Российская академия наук
Отделение математических наук РАН
Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН
Национальный комитет РАН по распознаванию образов и анализу изображений

Национальная академия наук Украины
Крымский научный центр НАНУ
Крымская академия наук
Таврический национальный университет им. В. И. Вернадского

Национальная академия наук Беларуси

при поддержке

Российского фонда фундаментальных исследований
Компаний Форексис и ЦСПиР

Интеллектуализация обработки информации

ИОИ-2010

**Республика Кипр, г. Пафос,
17–24 октября 2010**

Доклады 8-й международной конференции

МАКС ПРЕСС
Москва, 2010

УДК 004.85+004.89+004.93+519.2+519.25+519.7
ББК 22.1:32.973.26-018.2
И73

И73 **Интеллектуализация обработки информации:** 8-я международная конференция. Республика Кипр, г. Пафос, 17–24 октября 2010 г.: Сборник докладов. — М.: МАКС Пресс, 2010. — 556 с.

ISBN 978-5-317-03409-2

В сборнике представлены доклады 8-й Международной конференции «Интеллектуализация обработки информации–2010», проводимой Вычислительным центром им. А. А. Дородницына РАН, Таврическим национальным университетом им. В. И. Вернадского Национальной академии наук Украины и Национальной академией наук Беларуси при финансовой и организационной поддержке РФФИ и компаний Форексис и ЦСПиР.

Конференция проводится с 1989 года; начиная с 2000 года — регулярно один раз в два года, и является представительным научным форумом в области интеллектуального анализа данных, машинного обучения, распознавания образов и анализа изображений, обработки сигналов, дискретного анализа.

УДК 004.85+004.89+004.93+519.2+519.25+519.7
ББК 22.1:32.973.26-018.2

ISBN 978-5-317-03409-2

© Авторы докладов, 2010
© Вычислительный центр РАН,
Таврический национальный университет, 2010

Международный оргкомитет

Сопредседатели: Журавлев Юрий Иванович, *академик РАН, Россия*
Сергиенко Иван Васильевич, *академик НАН Украины*
Абламейко Сергей Владимирович *академик НАН Беларуси*

Учёный секретарь: Чехович Юрий Викторович, *к.ф.-м.н.*

Члены оргкомитета: Матросов Виктор Леонидович, *академик РАН*
Устинин Михаил Николаевич, *д.ф.-м.н.*
Инякин Андрей Сергеевич, *к.ф.-м.н.*
Песков Николай Владимирович, *к.ф.-м.н.*

Программный комитет

Сопредседатели: Рудаков Константин Владимирович, *чл.-корр. РАН, Россия*
Донской Владимир Иосифович, *д.ф.-м.н., Украина*
Краснопрошин Виктор Владимирович, *д.ф.-м.н., Беларусь*

Учёный секретарь: Воронцов Константин Вячеславович, *д.ф.-м.н.*

Члены комитета: Сойфер Виктор Александрович, *чл.-корр. РАН*
Гупал Анатолий Михайлович, *д.ф.-м.н.*
Гуревич Игорь Борисович, *к.ф.-м.н.*
Дорофеюк Александр Александрович, *д.ф.-м.н.*
Местецкий Леонид Моисеевич, *д.т.н.*
Моттль Вадим Вячеславович, *д.т.н.*
Пытьев Юрий Петрович, *д.ф.-м.н.*
Рейер Иван Александрович, *к.т.н.*
Рязанов Владимир Васильевич, *д.ф.-м.н.*
Тузиков Александр Васильевич, *д.ф.-м.н.*
Чуличков Алексей Иванович, *д.ф.-м.н.*

Технический комитет

Председатель: Громов Андрей Николаевич

Члены комитета: Ивахненко Андрей Александрович
Каневский Даниил Юрьевич
Лисица Андрей Валерьевич
Помазкова Евгения Владимировна
Быкова Елена Анатольевна

Рецензенты

Баврина А. Ю.
Белов А. М.
Бурнаев Е. В.
Ветров Д. П.
Воронцов К. В.
Вялый М. Н.
Гашников М. В.
Глумов Н. И.
Гуров С. И.
Дьяконов А. Г.
Донской В. И.
Золотова Т. В.
Кельманов А. В.
Корбут А. А.
Кропотов Д. А.
Кузнецов С. О.
Ланге М. М.
Майсурадзе А. И.
Меньшиков И. С.
Местецкий Л. М.
Мясников В. В.
Мясников Е. В.
Немирко А. П.
Обухов Ю. В.
Переверзев-Орлов В. С.
Рейер И. А.
Рудаков К. В.
Сигал И. Х.
Сметанин Ю. Г.
Стрижов В. В.
Торшин И. Ю.
Устинин М. Н.
Файзулин Р. Т.
Федотов Н. Г.
Хашин С. И.
Хачай М. Ю.
Чернов В. М.
Чехович Ю. В.
Чуличков А. И.
Чучупал В. Я.
Янковская А. Е.

Российская секция 8-й Международной конференции «Интеллектуализация обработки информации-2010»

Оргкомитет

Председатель: Журавлев Юрий Иванович, *академик РАН*

Учёный секретарь: Чехович Юрий Викторович, *к.ф.-м.н.*

Члены оргкомитета: Матросов Виктор Леонидович, *академик РАН*
Устинин Михаил Николаевич, *д.ф.-м.н.*
Инякин Андрей Сергеевич, *к.ф.-м.н.*
Песков Николай Владимирович, *к.ф.-м.н.*

Программный комитет

Председатель: Рудаков Константин Владимирович, *чл.-корр. РАН*

Учёный секретарь: Воронцов Константин Вячеславович, *д.ф.-м.н.*

Члены комитета: Сойфер Виктор Александрович, *чл.-корр. РАН*
Гуревич Игорь Борисович, *к.ф.-м.н.*
Дорофеюк Александр Александрович, *д.ф.-м.н.*
Местецкий Леонид Моисеевич, *д.т.н.*
Моттль Вадим Вячеславович, *д.т.н.*
Пытьев Юрий Петрович, *д.ф.-м.н.*
Рейер Иван Александрович, *к.т.н.*
Рязанов Владимир Васильевич, *д.ф.-м.н.*
Чуличков Алексей Иванович, *д.ф.-м.н.*

Рецензенты

Баврина А. Ю.
Белов А. М.
Бурнаев Е. В.
Ветров Д. П.
Воронцов К. В.
Вялый М. Н.
Гашников М. В.
Глумов Н. И.
Гуров С. И.
Дьяконов А. Г.
Золотова Т. В.
Кельманов А. В.
Корбут А. А.
Кропотов Д. А.
Кузнецов С. О.
Ланге М. М.
Майсурадзе А. И.
Меньшиков И. С.
Местецкий Л. М.
Мясников В. В.
Мясников Е. В.
Немирко А. П.
Обухов Ю. В.
Переверзев-Орлов В. С.
Рейер И. А.
Рудаков К. В.
Сигал И. Х.
Сметанин Ю. Г.
Стрижов В. В.
Торшин И. Ю.
Устинин М. Н.
Файзулин Р. Т.
Федотов Н. Г.
Хашин С. И.
Хачай М. Ю.
Чернов В. М.
Чехович Ю. В.
Чуличков А. И.
Чучупал В. Я.
Янковская А. Е.

Школа молодых ученых в рамках Российской секции 8-й Международной конференции «Интеллектуализация обработки информации-2010»

Оргкомитет

Председатель: Чехович Юрий Викторович, *к.ф.-м.н.*

Учёный секретарь: Рейер Иван Александрович, *к.т.н.*

Члены оргкомитета:
Журавлев Юрий Иванович, *академик РАН*
Матросов Виктор Леонидович, *академик РАН*
Устинин Михаил Николаевич, *д.ф.-м.н.*
Инякин Андрей Сергеевич, *к.ф.-м.н.*
Песков Николай Владимирович, *к.ф.-м.н.*

Программный комитет

Председатель: Рудаков Константин Владимирович, *чл.-корр. РАН, Россия*

Учёный секретарь: Воронцов Константин Вячеславович, *д.ф.-м.н.*

Члены комитета:
Сойфер Виктор Александрович, *чл.-корр. РАН*
Гуревич Игорь Борисович, *к.ф.-м.н.*
Дорофеюк Александр Александрович, *д.ф.-м.н.*
Местецкий Леонид Моисеевич, *д.т.н.*
Моттль Вадим Вячеславович, *д.т.н.*
Пытьев Юрий Петрович, *д.ф.-м.н.*
Рязанов Владимир Васильевич, *д.ф.-м.н.*
Чуличков Алексей Иванович, *д.ф.-м.н.*

Рецензенты

Ветров Д. П.
Воронцов К. В.
Гашников М. В.
Глумов Н. И.
Гуров С. И.
Дьяконов А. Г.
Кропотов Д. А.
Ланге М. М.
Майсурадзе А. И.
Местецкий Л. М.
Мясников В. В.
Мясников Е. В.
Рейер И. А.
Рудаков К. В.
Стрижов В. В.
Федотов Н. Г.
Хачай М. Ю.
Чернов В. М.
Чехович Ю. В.
Чуличков А. И.

Краткое оглавление

(TF) Theory and Fundamentals of Intelligent Information Processing
Фундаментальные основы интеллектуального анализа данных 5

(MM) Methods and Models of Intelligent Information Processing
Методы и модели интеллектуального анализа данных 99

(SM) Modelling and Metamodelling of Systems and Processes
Моделирование и метамоделирование систем и процессов 200

(OC) Optimization and Computational Complexity
Оптимизация и сложность вычислений 236

(DA) Discrete Analysis, Coding Theory, Information Theory
Дискретный анализ, теория кодирования, теория информации 297

(IA) Image Processing, Analysis, and Recognition
Обработка, анализ и распознавание изображений 303

(SP) Signal Processing and Analysis
Обработка и анализ сигналов 403

(AG) Applications: Earth Science
Приложения в области наук о Земле 414

(AB) Applications: Medicine, Biology, Biometrics
Приложения в области медицины, биологии, биометрии 434

(BI) Applications: Bioinformatics
Приложения в области биоинформатики 469

(AT) Applications: Text Mining, Web Mining, and Information Retrieval
Приложения в области анализа текстов и информационного поиска 495

(AP) Applications: Industry and Transport
Приложения в промышленности и транспорте 520

Содержание 541

Алфавитный указатель авторов 548

Submodular decomposition approach for inference in Markov random fields*

Vetrov D., Osokin A.
vetrovd@yandex.ru, anton.osokin@gmail.com
Russia, Moscow, Moscow State University

In the paper we address the problem of finding the most probable state of discrete Markov random field (MRF). Being practically important this problem is known to be NP-hard in general. We suggest a new type of MRF decomposition into a series of easy-to-solve submodular binary problems. This decomposition leads to a lower bound for optimization criterion. We study theoretical properties of the lower bound maximization algorithm. We show the applicability of our approach by comparing it with the state-of-the-art α-expansion algorithm on a number of real and synthetic datasets.

The problem of effective Bayesian inference arises in many applied domains, e. g. in machine learning, computer vision, decision-making, etc. One of the most intriguing problems is the development of approximate inference algorithms for the problems that are NP-hard in general. Probably the most important among them is the inference problem in cyclic discrete Markov random fields (MRF) with maximal cliques of size two. It can be shown that the inference in this case is equivalent to the optimization of discrete function represented as a sum of unary and pairwise terms.

Although NP-hard in general there are several special cases when the inference problems can be solved exactly in polynomial time. One example is dynamic programming approach [1] for inference in tree-structured graphs. Min-cut/max-flow algorithms can efficiently solve the inference problem on arbitrary graphs when all the variables are binary and pairwise potentials meet so-called submodularity constraints [3, 4]. Recently advanced approximate methods based on MRF decomposition have appeared [10, 5, 6]. In tree-reweighted message passing (TRW) the MRF with cycles is split to a number of acyclic subgraphs (trees), for each of them inference is made independently with the subsequent harmonization of optimal solutions. Being very general TRW also provides a lower bound on the criterion function.

In this paper we develop an alternative framework for approximate inference in MRF. We present submodular decomposition (SMD) technique. Instead of tree-based decomposition we split the problem into a number of submodular problems. For harmonization of optimal solutions of different subproblems we use the dual decomposition approach [6]. We explore SMD theoretical properties and perform experimental comparison with the state-of-the-art α-expansion algorithm [2].

Problem formulation

Markov random field is a probabilistic model of the following form. Let $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ be an undirected graph with $\mathcal{V}$ and $\mathcal{E}$ being the sets of nodes and edges respectively. With each node we associate a discrete variable $x_j \in \{1, \ldots, P\}$. For each node and edge we define a non-negative potential function $\psi_{\cdot}(\cdot)$. The joint distribution of x's is defined up to a normalizing constant as a product of potential functions

$$p(X) = \frac{1}{Z} \prod_{j \in \mathcal{V}} \psi_j(x_j) \prod_{(i,j) \in \mathcal{E}} \psi_{ij}(x_i, x_j).$$

The inference problem in MRF corresponds to the search of the most probable configuration $X^* = \arg\max p(X)$. Taking negative log we come to min-energy formulation

$$E(\boldsymbol{x}) = \sum_{(j \in \mathcal{V})} \theta_j(x_j) + \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \theta_{ij}(x_i, x_j) \to \min_{X \in \{1,\ldots,P\}^{|\mathcal{V}|}}, \quad (1)$$

The inference problems of such kind often arise in computer vision. The classical example is image semantic segmentation problem. Here we would like to find objects from a predefined set (e. g. cars, faces, background, etc.) on the image. We associate a class with each object type. To solve the problem we construct a graph $\mathcal{G}$, where each node corresponds to a single pixel of an image and the neighboring pixels are connected by edges. The potential function $\psi_j(x_j)$ then reflects how likely is the j-th pixel from class x_j while pairwise terms $\psi_{ij}(x_i, x_j)$ allow to take into account the context, e. g. by penalizing the cases when neighboring pixels belong to different classes. The image segmentation problem differs from the conventional classification problem in a way that we want to take into account the similarity of class labels for neighboring pixels in order to have more compact areas. Other applications of MRF formalism include image denoising, video processing, stereo reconstruction, collage creation, etc. (see [7] for overview). The problem (1) is known to be NP-hard in general so we are interested in finding approximate solution.

There is an important special case when $P = 2$ and pairwise potential functions satisfy the submodularity constraint

$$\theta_{ij}(0,0) + \theta_{ij}(1,1) \leqslant \theta_{ij}(0,1) + \theta_{ij}(1,0). \quad (2)$$

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (projects 08-01-00405, 10-01-00131, 10-01-90015) and the Russian President Grant MK-3827.2010.9.

In this case problem (1) can be solved exactly in polynomial time by min-cut algorithms [3]. If $P > 2$ the condition like (2) does not exist and only approximate algorithms, e. g. α-expansion, are available [2].

Submodular decomposition

Consider the indicator parametrization of (1) by establishing auxiliary binary variables $Y = \{y_{jp}\} \in \in \{0,1\}^{|\mathcal{V}|\times P}$:

$$y_{jp} = \begin{cases} 1, & x_j = p\,; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Denote $\theta_j(p) = \theta_{jp}$ and $\theta_{ij}(p,q) = \theta_{ij,pq}$. Then the problem (1) takes the form

$$E(Y) = \sum_{j\in\mathcal{V}}\sum_{p=1}^{P}\theta_{jp}y_{jp} + \sum_{(i,j)\in\mathcal{E}}\sum_{p,q=1}^{P}\theta_{ij,pq}\,y_{ip}\,y_{jq} \to \min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}}. \quad (3)$$

Here we denoted the set of *local* constraints by $\mathcal{L} = \{Y \mid y_{jp} \in \{0,1\}\}$ and the set of *global* constraints by $\mathcal{G} = \{Y \mid \sum_{p=1}^{P} y_{jp} = 1,\ \forall j \in \mathcal{V}\}$. The first group of constraints requires y_{jp} to be indicator variables while the second group provides consistency of graph labeling, i. e. each node belongs to one and only one class.

In what follows we assume that

$$\theta_{ij,pq} = C_{ij}(1 - \delta_{pq}), \quad (4)$$

where $\delta_{pq} = 1$ iff $p = q$ and C_{ij} are non-negative constants. Then we may rewrite the energy (3) as follows

$$\min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y) = \min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} \sum_{p=1}^{P}\left(\sum_{j\in\mathcal{V}}\theta_{jp}y_{jp} + \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in\mathcal{E}} C_{ij}\big[y_{ip}(1-y_{jp}) + y_{jp}(1-y_{ip})\big]\right) =$$

$$\min_{\substack{Y_p\in\{0,1\}^{|\mathcal{V}|}:\\ \sum Y_p = \mathbf{1}}} \sum_{p=1}^{P} E_p(Y_p) \geqslant \min_{Y_p\in\{0,1\}^{|\mathcal{V}|}} \sum_{p=1}^{P} E_p(Y_p) = \sum_{p=1}^{P} \min_{Y_p\in\{0,1\}^{|\mathcal{V}|}} E_p(Y_p).$$

Here we denoted the pth column of Y by Y_p. Note that each $E_p(Y_p)$ is a submodular function so that we can find $\min_{Y_p\in\{0,1\}^{|\mathcal{V}|}} E_p(Y_p)$ efficiently. To reconcile the minimizers of E_p consider a Lagrangian

$$L(Y,\Lambda) = \sum_{p=1}^{P} E_p(Y_p) + \sum_{j\in\mathcal{V}}\lambda_j\left(\sum_{p=1}^{P} y_{jp} - 1\right). \quad (5)$$

Now perform what we call submodular decomposition (SMD) by replacing NP-hard optimization problem (3) with a series of simpler problems. The following lower bound is valid for the initial problem (3):

$$\min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y) = \min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} L(Y,\Lambda) \geqslant \max_{\Lambda}\min_{Y\in\mathcal{L}} L(Y,\Lambda) = \max_{\Lambda}\left[\sum_{p=1}^{P}\min_{Y_p\in\{0,1\}^{|\mathcal{V}|}}\left(E_p(Y_p) + \sum_{j\in\mathcal{V}}\lambda_j y_{jp}\right) - \sum_{j\in\mathcal{V}}\lambda_j\right]. \quad (6)$$

Note that the minimization of $E_p(Y_p) + \sum_{j\in\mathcal{V}}\lambda_j y_{jp}$ can still be done by min-cut algorithms since the function remains submodular. The maximization problem (6) is concave w. r. t. Λ and hence the solution can be found via subgradient ascent.

Theoretical properties of SMD

Consider a QP-relaxation of (3)

$$E(Y) = \sum_{j\in\mathcal{V}}\sum_{p=1}^{P}\theta_{jp}y_{jp} + \sum_{(i,j)\in\mathcal{E}}\sum_{p,q=1}^{P}\theta_{ij,pq}\,y_{ip}\,y_{jq} \to \min_{Y\in\mathcal{Q}\cap\mathcal{G}}, \quad (7)$$

where $\mathcal{Q} = \{Y \mid y_{jp} \in [0,1]\}$.

Theorem 1. *The minimum values of* (3) *and* (7) *are equal and among the optimal solutions of relaxed problem* (7) *there always exists an optimal solution of problem* (3).

The proof can be found e. g. in [8].

Theorem 2. *The minimal value of energy* (3) *equals the minimax value of QP-relaxed Lagrangian* (5)

$$\min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y) = \min_{Y\in\mathcal{Q}}\max_{\Lambda} L(Y,\Lambda).$$

Proof. From the previous theorem it follows

$$\min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y) = \min_{Y\in\mathcal{Q}\cap\mathcal{G}} E(Y).$$

Now consider an arbitrary point $Y \in \mathcal{Q}\setminus\mathcal{G}$. For any such point the second term of Lagrangian $\sum_{j\in\mathcal{V}}\lambda_j\left(\sum_{p=1}^{P} y_{jp} - 1\right)$ is non-zero and thus can be made infinitely large by the choice of corresponding Λ's. This implies $Y \in \mathcal{Q}\cap\mathcal{G}$ and

$$\min_{Y\in\mathcal{Q}}\max_{\Lambda} L(Y,\Lambda) = \min_{Y\in\mathcal{Q}\cap\mathcal{G}}\max_{\Lambda} L(Y,\Lambda) = \min_{Y\in\mathcal{Q}\cap\mathcal{G}} E(Y).$$

■

Theorem 3. *The energy lower bound* (6) *equals the maximin value of QP-relaxed Lagrangian* (5)

$$\min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y) \geqslant \max_{\Lambda}\min_{Y\in\mathcal{L}} L(Y,\Lambda) = \max_{\Lambda}\min_{Y\in\mathcal{Q}} L(Y,\Lambda).$$

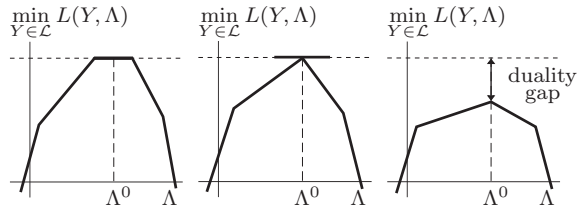


Fig. 1. Three possible cases in SMD dual problem. The optimal energy value is shown by dotted line. The left plot corresponds to the case when we are able to find both optimal energy and optimal configuration of labels. The middle plot shows the case when there is zero duality gap but we are not guaranteed to find the optimal configuration of labels. The horizontal face corresponds to Y^1 (see theorem 4). The right plot illustrates the case when there's no horizontal face coming through the maximin point. Then we observe a non-zero duality gap.

Proof. From the first theorem it follows that for all Λ

$$\min_{Y_p\in\{0,1\}^{|\mathcal{V}|}}\left[E_p(Y_p)+\sum_{j\in\mathcal{V}}\lambda_j y_{jp}\right]= \min_{Y_p\in[0,1]^{|\mathcal{V}|}}\left[E_p(Y_p)+\sum_{j\in\mathcal{V}}\lambda_j y_{jp}\right]. \quad (8)$$

Then $\min\limits_{Y\in\mathcal{L}} L(Y,\Lambda)=\min\limits_{Y\in\mathcal{Q}} L(Y,\Lambda)$. The latter equation is true for all Λ. By taking maximum w. r. t. Λ we prove the theorem. ■

Note that in the space $(\mathcal{Q}\cap\mathcal{G})\times\mathbb{R}^{|\mathcal{V}|}$ the Lagrangian is smooth and differentiable function. The last two theorems show that if and only if $L(Y,\Lambda)$ has a saddle-point in $(\mathcal{Q}\cap\mathcal{G})\times\mathbb{R}^{|\mathcal{V}|}$, SMD converges to the global optimum of (3). However, the QP-relaxed energy minimization is still NP-hard problem regardless the smoothness of the criterion function.

Now consider the properties of $L(Y,\Lambda)$ when $Y\in\in\mathcal{L}$, i. e. all $y_{jp}\in\{0,1\}$. Then the maximin problem can be viewed as a maximization of piecewise linear function in the space of Λ's. Each $Y\in\mathcal{L}$ defines a hyperplane and $\min\limits_{Y\in\mathcal{L}} L(Y,\Lambda)$ is a concave polytope, each face of which is defined by some $Y\in\mathcal{L}$.

Theorem 4. *Let (Y^0,Λ^0) be a maximin point of the Lagrangian, i. e. $(Y^0,\Lambda^0)=\arg\max\limits_{\Lambda}\min\limits_{Y\in\mathcal{L}} L(Y,\Lambda)$. The global minimum of energy $E(Y)$ equals $L(Y^0,\Lambda^0)$ if and only if there is a horizontal face defined by Y^1 in the polytope such that $L(Y^1,\Lambda_0)=L(Y^0,\Lambda^0)$.*

If it is known additionally that subgradient of $\min\limits_{Y\in\mathcal{L}} L(Y,\Lambda)$ at the point Λ^0 consists of only one vector then Y^0 is the optimal solution of (3).

Proof. Since $\min\limits_{Y\in\mathcal{L}} L(Y,\Lambda)$ is a piecewise linear function three cases are possible at its maximum (see fig. 1). In the first case there is a plateau on the top of the polytope. If subgradient consists of only one vector then the function is differentiable at the point Λ^0, i. e. Λ^0 is located somewhere *inside* the horizontal face that is defined by $\arg\min L(Y,\Lambda^0)=Y^0$. But this means that $L(Y^0,\Lambda)$ does not depend on Λ, i. e. $Y^0\in\mathcal{G}$. For all $Y\in\mathcal{G}$ holds $L(Y,\Lambda)=E(Y)$ and $\min\limits_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} L(Y,\Lambda)=\min\limits_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y)$.

Now consider the second case when there is no plateau but there exists a horizontal plane which passes through the point $\big(\Lambda^0, L(Y^0,\Lambda^0)\big)$. Let Y^1 be the value of $Y\in\mathcal{L}$ which corresponds to that plane. Since the plane is horizontal $Y^1\in\mathcal{G}$ as well. Then it holds

$$L(Y^0,\Lambda^0)=L(Y^1,\Lambda^0)=\min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} L(Y,\Lambda^0)=\min_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y).$$

Now assume that $L(Y^0,\Lambda^0)=\min\limits_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y)=E(Y^1)$. On the other hand $\min\limits_{Y\in\mathcal{L}\cap\mathcal{G}} E(Y)=E(Y^1)=L(Y^1,\Lambda^0)$. Hence $L(Y^0,\Lambda^0)=L(Y^1,\Lambda^0)$. From that it follows that there is a plane which corresponds to Y^1 passing through the point $\big(\Lambda^0, L(Y^0,\Lambda^0)\big)$. Since $Y^1\in\mathcal{G}$ the plane is horizontal and we have either the first or the second case.

Finally there can be the third case when there's no horizontal plane at maximin point. In this case a non-zero duality gap takes place and we can only get the lower bound for optimal value of energy $E(Y)$. ■

The condition $Y\in\mathcal{G}$ makes the solution consistent and it is similar to the strong tree agreement (STA) in TRW approach.

Experiments

We test our algorithm on synthetic and real problems. Similarly to [5] as a synthetic setting we take a 10-label problem on a 30×30 grid graph with 4-neighborhood system. Unary potentials are generated as independent gaussians: $\theta_{ip}=\mathcal{N}(0,1)$. Parameters C_{ij} of pairwise potentials are generated as an absolute value of a point from a gaussian distribution $\mathcal{N}(0,0.2)$. Figure 2 shows the average result of SMD algorithm on 100 sample problems in comparison to the result of a well-known α-expansion algorithm [2].

As a real problem we use image denoising. We generate an 8-color 100×140 image and substitute random 60% of pixels for random colors. We use a standard 4-neighborhood representation of an image and each color corresponds to a specific label. As unary potentials we use indicator functions: $\theta_{ip}=[Y_i\neq p]$. Parameters C_{ij} for pairwise potentials are all set equal to 0.5. Figure 3 shows the image without noise, the noisy image and results of α-expansion and SMD algorithms.

Due to the lack of space we leave some implementation details out of scope of this paper. We use an adaptive multiplier step-size update rule in subgradient ascent method as recommended in [6]. To choose a so-

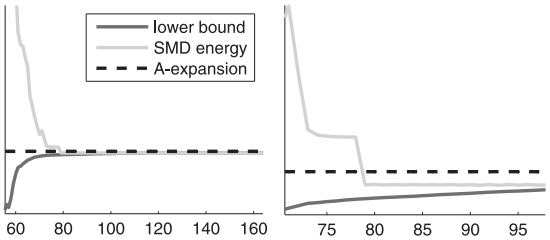


Fig. 2. Results on synthetic problems. The horizontal axis corresponds to an iteration number and the vertical axis corresponds to an average energy level. The upper curve shows the decreasing energy during iterations in the SMD algorithm while the lower curve shows the increasing lower bound. The horizontal line corresponds to an energy level that can be obtained by α-expansion algorithm. The right plot is a zoomed version of the left plot.

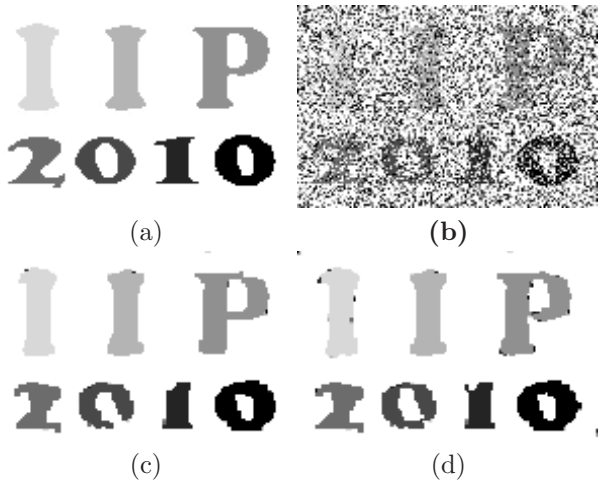


Fig. 3. Results for the image denoising problem. (a) shows the initial image, (b) shows the noisy image, (c) and (d) show the results of α-expansion and SMD algorithm respectively.

lution of primal problem (3) in case of disagreement of subproblems solutions we use ICM strategy [12].

Discussion and future work

In the paper we presented a novel approach to approximate Bayesian inference in MRFs with cycles based on the decomposition of initial NP-hard problem into a number of submodular problems. Our approach provides a new lower bound for the optimal energy value and we investigated the cases when this bound is tight. We also showed that sometimes SMD gives lower energy values comparing to popular α-expansion algorithm. Some questions still remain open:

— Are there any explicit conditions for the existence of a saddle-point of Lagrangian (5)?
— Is it possible to derive a bound on the value of gap between minimax and maximin in general?
— Are there any partial label optimality guarantee for partially coincident subproblems solutions (by analogy with week tree agreement in TRW)?

As directions for future research two topics should be mentioned. It is interesting to compare SMD approach with TRW algorithms. In particular it is worth examining the cases when one method provides tight lower bound while another does not. The second topic is the inclusion of global constraints into SMD algorithm. Recent work by Kolmogorov [11] introduced marginal probability field (MPF) framework which made it possible to establish some marginal statistics (e. g. on the size of each class) in MRFs (also see the paper [9] in these proceedings). For performing inference in MPF it is necessary to have approximate MRF inference algorithm that provides a lower bound for the energy, hence only TRW and SMD are applicable.

References

[1] *Pearl J.* Probabilistic reasoning in intelligent systems: networks of plausible inference. — San Francisco: Morgan Kaufman, 1988. — 576 p.

[2] *Boykov Y., Veksler O., Zabih R.* Fast approximate energy minimization via graph cuts // IEEE TPAMI. — 2001. — Vol. 23, No. 11. — Pp. 1222–1239.

[3] *Greig D., Porteous B., Seheult A.* Exact maximum a posteriori estimation for binary images // JRSSB. — 1989. — Vol. 51, No. 2. — Pp. 271—279.

[4] *Kolmogorov V., Zabih R.* What energy functions can be minimized via graph cuts // IEEE TPAMI. — 2004. — Vol. 26, No. 2. — Pp. 147—159.

[5] *Kolmogorov V.* Convergent tree-reweighted message passing for energy minimization // IEEE TPAMI. — 2006. — Vol. 28, No. 10. — Pp. 1568–1583.

[6] *Komodakis N., Paragios N., Tziritas G.* MRF energy minimization and beyond via dual decomposition // Submitted to IEEE TPAMI. Under review. — 2010.

[7] *Szeliski R. et al.* A comparative study of energy minimization methods for Markov random fields with smoothness-based priors // IEEE TPAMI. — 2008. — Vol. 30, No. 6. — Pp. 1068—1080.

[8] *Ravikumar P., Lafferty J.* Quadratic programming relaxations for metric labeling and Markov random fields MAP estimation // ICML. — 2006.

[9] *Kropotov D., Laptev D., Osokin A., Vetrov D.* Signal segmentation with label frequency constraints using dual decomposition approach for hidden Markov models // Proc. of 8th Intelligent Information Processing. — 2010. — Pp. 403–406.

[10] *Wainwright M. J., Jaakkola T. S., Willsky A.S.* MAP estimation via agreement on trees: message-passing and linear programming // IEEE Transactions on Information Theory. — 2005. — Vol. 51, No. 11. — Pp. 3697–3717.

[11] *Woodford O., Rother C., Kolmogorov V.* A global perspective on MAP inference for low-level vision // ICCV. — 2009.

[12] *Kittler J., Föglein J.* Contextual classification of multispectral pixel data // Image and Vision Computing. — 1984. — Vol. 2, No. 1. — Pp. 13–29.

Эквивалентность потенциальных функций и линейных пространств представления объектов произвольной природы*

Абрамов В. И., Середин О. С., Сулимова В. В., Моттль В. В.
v.abramov.work@gmail.com, oseredin@yandex.ru, vsulimova@yandex.ru, vmottl@yandex.ru
Тула, Тульский государственный университет

Рассматривается проблема эквивалентных преобразований линейных пространств, определяемых потенциальными функциями. Предлагается метод подбора положения нуля линейного пространства и последующего нормирования потенциальной функции, наиболее соответствующих решаемой практической задаче.

Equivalence of kernel functions and linear-space representations of arbitrary real-world objects*

Abramov V. I., Seredin O. S., Sulimova V. V., Mottl V. V.
Tula State University, Tula, Russia

The problem of equivalence of kernels and kernel-induced linear spaces is considered. A method of both choosing the null element and further kernel normalization is proposed with the purpose of most appropriate object representation within the given practical application.

Популярность метода потенциальных функций в современной информатике (kernel-based approach) объясняется тем фактом, что введение на любом множестве объектов реального мира Ω потенциальной функции $K(\omega',\omega'')$, $\omega',\omega'' \in \Omega$ [1, 3] «погружает» это множество в некоторое линейное пространство и определяет в нем евклидову метрику $\rho(\omega',\omega'')$ [2]. Такое погружение позволяет полностью использовать преимущества линейных методов, в частности, метода опорных векторов или k средних, для беспризнакового анализа данных об объектах произвольной природы.

Однако серьёзной проблемой на пути использования потенциальных функций является тот факт, что в практических задачах, в частности, в задачах анализа аминокислотных последовательностей, значения потенциальных функций для разных пар объектов сильно различны [4, 5], например, могут лежать в диапазоне $10^{-500}\ldots10^{350}$. Обычно за счет ограниченности разрядности типов данных компьютера становится невозможным применение таких потенциальных функций в любых задачах анализа данных.

В данной работе мы показываем, что существует континуум преобразований, приводящих к эквивалентным потенциальным функциям и, следовательно, сохраняющих евклидову метрику. Предлагается выбрать из них такое эквивалентное преобразований, которое позволит преобразовать значения потенциальной функции наилучшим образом с точки зрения представления типов данных, допустимых в разрядной сетке архитектуры конкретной ЭВМ. Важно отметить, что все результаты методов распознавания образов и кластеризации, получаемые линейными методами на основе эквивалентных потенциальных функций, неизбежно совпадают.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-07-00394.

Линейное пространство, определяемое потенциальной функцией

Пусть $\Omega = \{\omega_j, j = 1,\ldots,N\}$ — некоторое множество объектов реального мира с заданной потенциальной функцией $K(\omega',\omega'')$, $\omega',\omega'' \in \Omega$, которая погружает множество объектов в линейное пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ и определяет в нем евклидову метрику, которую можно рассчитать по формуле:

$$\rho(\omega',\omega'') = \sqrt{K(\omega',\omega') + K(\omega'',\omega'') - 2K(\omega',\omega'')}.$$

Определение 1. *Пусть $\langle\omega',\omega''\rangle$ — некоторая упорядоченная пара элементов линейного пространства $\tilde{\Omega}$. Будем говорить, что элемент $\omega \in \tilde{\Omega}$ соосен паре элементов $\langle\omega',\omega''\rangle$ с коэффициентом $c \in \mathbb{R}$, если*

$$\rho(\omega',\omega) = |c|\ \rho(\omega',\omega'') \text{ и}$$
$$\rho(\omega'',\omega) = |c-1|\ \rho(\omega',\omega'').$$

Этот факт будем обозначать символом $\omega = \mathrm{coax}\,(\langle\omega',\omega''\rangle;\ c)$.

Теорема 1. *В линейном пространстве $\tilde{\Omega}$ для любой упорядоченной пары $\langle\omega',\omega''\rangle$, $\omega',\omega'' \in \tilde{\Omega}$, и любого числа $c \in \mathbb{R}$ существует только один элемент $\omega = \mathrm{coax}(\langle\omega',\omega''\rangle; c) \in \tilde{\Omega}$.*

Доказательство может быть найдено в [2].

Полученное расширенное множество $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ включает в себя все возможные соосные элементы для каждого ω_j, $j = 1,\ldots,N$ и нулевой элемент (центр) φ, если этих элементов не было в исходной совокупности.

Линейные операции

Для упорядоченной пары $\langle \varphi, \omega \rangle$, согласно теореме 1, существует один соосный с любым заданным коэффициентом $c \in \mathbb{R}$ элемент. Будем называть такой элемент результатом умножения ω на коэффициент c и обозначать $c\omega$

$$c\omega = \operatorname{coax}\left(\langle \varphi, \omega \rangle ;\ c\right). \tag{1}$$

Пусть, далее, $\omega', \omega'' \in \tilde{\Omega}$ — два произвольных элемента. Удвоенный элемент, соосный этим двум элементам с коэффициентом $c = 1/2$, будем называть их суммой и обозначать $\omega' + \omega''$:

$$\omega' + \omega'' = 2\ \operatorname{coax}(\langle \omega', \omega'' \rangle ;\ 1/2\ ). \tag{2}$$

Скалярным произведением в линейном пространстве $\tilde{\Omega}$ является сама потенциальная функция $K(\omega', \omega'')$.

Теорема 2. *Операции* (1), (2) *и потенциальная функция* $K(\omega', \omega'')$ *удовлетворяют всем требованиям, предъявляемым к линейным операциям и скалярному произведению.*

Доказательство может быть найдено в [2].

Эквивалентность потенциальных функций

Определение 2. *Будем называть две потенциальные функции эквивалентными, если они порождают одну и ту же метрику.*

Если $K(\omega', \omega'')$ — потенциальная функция относительно центра φ, то эквивалентную потенциальную функцию относительно другого центра $\tilde{\varphi}$ легко рассчитать по формуле:

$$K_1(\omega', \omega'') = K(\omega', \omega'') - K(\omega', \tilde{\varphi}) - \\ - K(\omega'', \tilde{\varphi}) + K(\tilde{\varphi}, \tilde{\varphi}), \tag{3}$$

где $K_1(\omega', \omega'')$ — значение потенциальной функции для объектов ω' и ω'', рассчитанное относительно нового центра; $K(\omega', \omega'')$ — исходное значение потенциальной функции для объектов ω' и ω''.

Будем выбирать новый центр в качестве линейной комбинации объектов $\omega_j,\ j = 1, \ldots, N$:

$$\varphi_1 = \sum_{j=1}^{N} a_j\, \omega_j,\ \sum_{j=1}^{N} a_j = 1. \tag{4}$$

Тогда, исходя из (3), расчет значений потенциальной функции относительно нового центра выполняется следующим образом:

$$K_1(\omega_j, \omega_k) = K(\omega_j, \omega_k) - \sum_{p=1}^{N} a_p K(\omega_j, \omega_p) - \\ - \sum_{p=1}^{N} a_p K(\omega_k, \omega_p) + \sum_{p=1}^{N} \sum_{q=1}^{N} a_p a_q K(\omega_p, \omega_q). \tag{5}$$

Таким образом, для нахождения нового центра необходимо выбрать коэффициенты $a_j,\ j = 1, \ldots, N$.

Выбор центра внутри группы объектов

В данной работе предлагается два способа выбора центра φ_1 внутри группы объектов:

1. В качестве центра используется объект, являющийся средним арифметическим элементов множества Ω:

$$a_j = \frac{1}{N},\ j = 1, \ldots, N. \tag{6}$$

Положительной чертой такого центра является простота его вычисления при увеличении компактности представления множества Ω, что иногда ведет к улучшению значений потенциальной функции.

Заметим, что выбор центра с коэффициентами (6) означает выполнение условия

$$\sum_{j=1}^{N} \rho(\varphi_1, x_j) \to \min.$$

2. В качестве центра используется объект, равноудаленный от элементов множества Ω:

$$\rho(\varphi_1, x_1) = \rho(\varphi_1, x_2) = \cdots = \rho(\varphi_1, x_N),$$

или, при представлении в виде новой потенциальной функции,

$$K_1(\omega_1, \omega_1) = K_1(\omega_2, \omega_2) = \cdots = K_1(\omega_N, \omega_N). \tag{7}$$

Исходя из условия (4), такой центр является единственным, а коэффициенты $a_j,\ j = 1, \ldots, N$ ищутся как решение системы уравнений, полученной с использованием (5) и (7):

$$\begin{cases} \sum\limits_{j=1}^{N} a_j = 1, \\ 2 \sum\limits_{k=1}^{N} \big[K(\omega_1, \omega_k) - K(\omega_2, \omega_k)\big] a_k = \\ \qquad = \big[K(\omega_1, \omega_1) - K(\omega_2, \omega_2)\big], \\ \qquad \cdots \\ 2 \sum\limits_{k=1}^{N} \big[K(\omega_{N-1}, \omega_k) - K(\omega_N, \omega_k)\big] a_k = \\ \qquad = \big[K(\omega_{N-1}, \omega_{N-1}) - K(\omega_N, \omega_N)\big]. \end{cases}$$

Найденный таким способом центр обладает свойством, что после пересчета матрицы значений потенциальной функции значения на диагонали будут одинаковы, так как представляют из себя ни что иное, как квадрат расстояния до центра. В остальном, центр обладает аналогичными свойствами, что и предложенный ранее.

Выбор положения центра на некоторой оси

В некоторых задачах анализа данных, например, аминокислотных последовательностей, в связи с особенностями методов вычисления потенциальной функции, описанные способы переноса центра линейного пространства дают результат, противоположный исходному — теперь диапазон значений потенциальной функции слишком сужается. Такое представление также нежелательно из-за ограниченности разрядной сетки компьютера, которая не обеспечит хранения всех различающихся цифр числа. Таким образом, новые значения потенциальной функции окажутся практически неразличимыми.

Мы предлагаем компромиссный вариант выбора центра. Пусть имеется некоторый исходный центр линейного пространства и тот, который был выбран в качестве нового по одному из перечисленных способов. Можно рассмотреть множество элементов, соосных старому и новому центру. Если выбирать в качестве центра некоторый элемент на этой оси, то можно увеличить или уменьшить расстояние между ним и группой объектов, что позволит варьировать диапазон значений потенциальной функции.

Рассмотрим первый способ (6) выбора центра внутри группы объектов. Тогда центр, соосный старому и новому центру с коэффициентом $c \in \mathbb{R}$, будет определяться выражением:

$$\varphi(c) = \varphi - c\varphi_1 = \varphi - \frac{c}{N}\sum_{j=1}^{N}\omega_j.$$

Для расчета значений потенциальной функции относительно такого центра приходим к следующему выражению:

$$K_{\varphi(c)}(\omega_j,\omega_l) = K(\omega_j,\omega_l) - \frac{c}{N}\sum_{k=1}^{N}K(\omega_j,\omega_k) - \\ - \frac{c}{N}\sum_{k=1}^{N}K(\omega_l,\omega_k) + \frac{c^2}{N^2}\sum_{k=1}^{N}\sum_{p=1}^{N}K(\omega_k,\omega_p).$$

Для дальнейшего использования полученные значения переводятся в типы данных конкретной архитектуры ЭВМ. При этом неизбежно возникает ошибка округления, которая влияет и на порождаемую потенциальной функцией метрику. В данной работе в качестве меры такой ошибки используется следующая величина:

$$g(c) = \max_{\substack{i=1,\dots,N\\ j=1,\dots,N}} \frac{\left|\rho(\omega_i,\omega_j) - \rho_{\varphi(c)}(\omega_i,\omega_j)\right|}{\rho(\omega_i,\omega_j)},$$

где $\rho(\omega_i,\omega_j)$ — реальное расстояние между объектами, $\rho_{\varphi(c)}(\omega_i,\omega_j)$ — расстояние между объектами, рассчитанное на основе значений потенциальной функции, представленных в разрядной сетке конкретной ЭВМ.

Предлагается в качестве центра выбирать тот, который максимально удален от объектов из множества Ω и от исходного центра. Таким образом, коэффициент c должен быть отрицательным и максимальным по модулю при выполнении некоторого ограничения на значение ошибки $g(c)$.

Нормирование значений потенциальной функции

Как описано ранее, такая потенциальная функция, как, например, построенная на множестве аминокислотных последовательностей, в связи с особенностями данных имеет диапазон значений, неприемлемый для представления в разрядной сетке компьютера. Перенос центра в ту или иную точку линейного пространства $\tilde{\Omega}$ меняет значения потенциальной функции. Однако может оказаться, что все значения потенциальной функции теперь находятся в узком диапазоне, но при этом больше максимально допустимого значения в разрядной сетке конкретной ЭВМ.

Предлагается использовать нормирование, при котором

$$K_{\varphi(c)}(\varphi_1,\varphi_1) = 1.$$

Следует отметить, что нормирование не искажает метрику, а приводит только к ее масштабированию.

В данном случае масштабный коэффициент вычисляется следующим образом:

$$k_s = \left(\frac{(c-1)^2}{N^2}\sum_{k=1}^{N}\sum_{p=1}^{N}K(\omega_k,\omega_p)\right)^{-1/2}.$$

Предложенное нормирование ведет к вычислению новой потенциальной функции в виде:

$$\bar{K}_{\varphi(c)}(\omega_j,\omega_l) = k_s^2 K_{\varphi(c)}(\omega_j,\omega_l). \qquad (8)$$

Экспериментальные исследования

Для апробации предложенного метода преобразования значений потенциальной функции без искажения метрики использовался массив из 17 белков вируса герпеса, относящихся к 8 классам. При использовании переноса центра линейного пространства без масштабирования полученных значений были получены результаты, представленные на рис. 2.

По горизонтальной оси представлены диапазоны значений потенциальной функции в логарифмическом масштабе. По вертикальной оси записан порядок коэффициента c, использованного для переноса центра в каждом конкретном случае. Отдельно внизу изображён исходный диапазон значений потенциальной функции ($c = 0$).

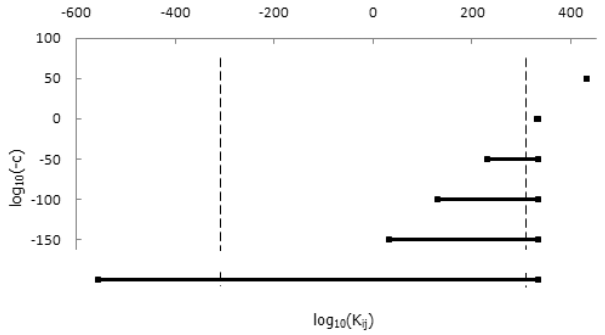


Рис. 1. Диапазон значений потенциальной функции при переносе центра линейного пространства.

Вертикальным пунктиром обозначен максимальный и минимальный порядок для типа данных double в MS Visual C++.

Рисунок показывает, что при таких данных без использования нормирования ни один из вариантов переноса центра линейного пространства не приводит к такому сужению диапазона значений потенциальной функции, чтобы они были представимы стандартным типом данных double. В результате, такие значения неприменимы в практических задачах.

Воспользуемся нормированием (8). Результат представлен на рис. 2.

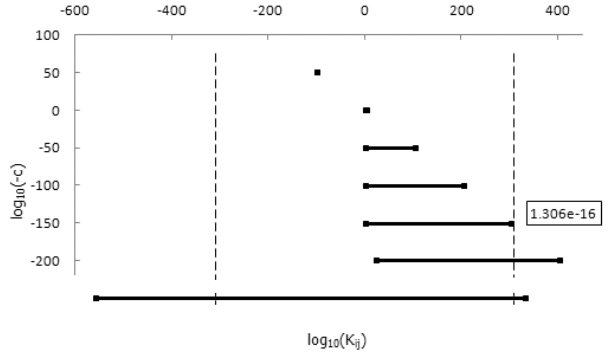


Рис. 2. Диапазон значений потенциальной функции при переносе центра линейного пространства и последующем нормировании (в рамке приведено значение ошибки округления).

Обозначения на данном рисунке аналогичны использованным на рис. 2 за исключением того, что для $c = -10^{-150}$ записана ошибка искажения метрики $g(c)$, вызываемая округлением до стандартных типов данных. В остальных случаях она не менее 1, т.е. максимальное изменение значения потенциальной функции равняется 100%, что неприемлемо. Однако в случае $c = -10^{-150}$ ошибка незначительна ($g \approx 10^{-16}$), а значит подобное эквивалентное преобразование потенциальной функции приводит к значениям, которые можно применять в решении практических задач.

Выводы

В данной работе предложен метод получения такой эквивалентной потенциальной функции, значения которой были бы удобны для конкретной практической задачи. Используется свойство потенциальной функции задавать линейное пространство, что ведёт к возможности переносить его центр. Результатом переноса будет преобразование значений потенциальной функции и, в частности, изменение диапазона их порядков.

Предложен вариант подбора положения центра на некоторой оси и при необходимости нормирование полученных значений, которые приводят к сужению диапазона значений к допустимому с точки зрения используемых типов данных ЭВМ. Следовательно, преобразованные значения потенциальной функции можно без дополнительной обработки использовать в существующих методах анализа данных.

Литература

[1] *Айзерман М. А., Браверман Э. М., Розоноэр Л. И.* Метод потенциальных функций в теории обучения машин. — Москва: Наука, 1970. — 384 с.

[2] *Моттль В. В.* Метрические пространства, допускающие введение линейных операций и скалярного произведения // Доклады академии наук. — 2003. — Т. 388, № 3. — С. 1–4.

[3] *Vapnik V. N.* Statistical Learning Theory. — New York: Wiley, 1998. — 736 p.

[4] *Mottl V. V., Seredin O. S., Sulimova V. V.* Mathematically correct methods of similarity measurement on sets of signals and symbol sequences of different length // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2005. — Vol. 15, No 1. — Pp. 87–89.

[5] *Schölkopf B., Tsuda K., Vert J.-P.* Kernel Methods in Computational Biology. — MIT Press, 2004. — 410 p.

Оценивание качества таксономических деревьев решений и кластерного ансамбля*

Бериков В. Б., ***Лбов Г. С.***
berikov@math.nsc.ru, lbov@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН

Рассматривается задача построения ансамбля деревьев решений в кластерном анализе при наличии разнотипных переменных. Предлагаются критерии качества дерева, основанные на частотной и байесовской оценках расстояния Кульбака–Лейблера между распределениями. Проводится экспериментальное исследование алгоритмов построения дерева. Теоретически исследуется поведение ансамбля, на основе модели попарной класификации и использовании понятий стабильности, однородности и корреляции в ансамбле.

Estimating quality of taxonomic decision trees and cluster ensemble*

Berikov V. B., ***Lbov G. S.***
Sobolev Institute of mathematics SB RAS, Novosibirsk, Russia

The problem of construction an ensemble of decision trees in cluster analysis at the presence of variables of mixed types is considered. We suggest the criteria of tree quality, based on the frequency and on the Bayes estimates of Kullbak–Leibler distance between distributions. The experimental study of algorithms of tree construction is conducted. The ensemble behavior is theoretically investigated with use of pair-wise classification model and by applying notions of stability, homogeneity and corrrelation in ensemble.

Одна из трудностей кластерного анализа возникает в случае анализа объектов, описываемых разнотипными переменными, измеренными в различных шкалах: количественной, порядковой, шкале наименований, булевой. В этом случае появляется методологическая проблема введения метрики в разнотипном пространстве. Другая трудность возникает при неустойчивости результатов группировки. Одним из возможных путей решения указанных проблем (см. [1]) является применение ансамбля таксономических деревьев решений.

В разработанных ранее алгоритмах построения таксономического дерева [2] осуществляется направленный поиск наилучшего по заданному критерию качества варианта. При этом используется критерий, основанный на понятии «относительного объема таксона». В предлагаемой работе рассматриваются модификации указанного критерия, основанные на применении расстояния Кульбака–Лейблера между распределениями. Для теоретического исследования коллективного решения используется модель ансамблевой попарной классификации.

Критерий качества дерева решений

Пусть имеется выборка объектов исследования $s = \{o^{(1)}, \ldots, o^{(N)}\}$, которая сформирована в результате отбора некоторых представителей генеральной совокупности. Каждый объект генеральной совокупности описывается с помощью набора переменных $X_1, \ldots, X_m$. Этот набор может включать переменные разных типов (количественные и качественные, под которыми будем понимать номинальные и булевы, а также порядковые). Пусть D_j обозначает множество значений переменной X_j (интервал в случае количественной или порядковой переменной; множество значений в случае качественной переменной). Обозначим через $x = x(o) = \big(x_1(o), \ldots, x_j(o), \ldots, x_m(o)\big)$ набор наблюдений переменных для объекта o.

Требуется сформировать дерево решений, определяющее разбиение объектов на $K \geqslant 2$ групп, так, чтобы заданный критерий качества принял бы оптимальное значение. Число классов может быть как выбрано заранее, так и не задано (в последнем случае оптимальное количество кластеров должно быть определено автоматически).

Пусть сформировано группировочное решение $G = \{C^{(1)}, \ldots, C^{(K)}\}$, где $C^{(k)} = \{o^{(i_1)}, \ldots, o^{(i_{n^{(k)}})}\}$, $n^{(k)}$ — число объектов, входящих в k-й кластер, $k = 1, \ldots, K$. Под критерием качества Q для полученного решения G, в случае разнотипного пространства, можно понимать суммарный относительный объем полученных «таксонов», где под таксоном T понимается прямоугольная подобласть минимального объема, заключающая объекты в многомерном пространстве: $Q(G) = \sum\limits_{k=1}^{K} V^{(k)}$, где $V^{(k)} = V(T^{(k)}) = \prod\limits_{j=1}^{m} \frac{|T_j^{(k)}|}{|D_j|}$ — относительный объем таксона $T^{(k)} = T(C^{(k)}) = \prod\limits_{j=1}^{m} T_j^{(k)}$, $T_j^{(k)} = \{X_j(o)\colon\ o \in C^{(k)}\}$ для качественной переменной X_j; $[\min\limits_{o \in C^{(k)}} X_j(o);\ \max\limits_{o \in C^{(k)}} X_j(o)]$ для количественной переменной, $|\cdot|$ означает мощность соответствующего множества или длину интервала.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №08-07-00136-а, 09-07-12087-офи_м, 10-01-00113-а.

Можно показать, что минимизация такого критерия эквивалентна отысканию таких подобластей $T^{(1)}, \ldots, T^{(K)}$, для которых максимальна сумма разностей между оценками вероятности принадлежности областям и вероятностями, соответствующими равномерному распределению (т. е. максимизации критерия

$$Q'(G) = \sum_k \Big(\big| \hat{\mathsf{P}}(x \in T^{(k)}) - \mathsf{P}_u(x \in T^{(k)}) \big| \Big),$$

где $\hat{\mathsf{P}}(x \in T^{(k)}) = \frac{n^{(k)}}{N}$ — относительная частота попадания в заданный таксон $T^{(k)}$, $\mathsf{P}_u(x \in T^{(k)}) = V(T^{(k)})$ — вероятность попадания в таксон при условии, что рассматриваются случайные независимые переменные, каждая из которых имеет равномерное распределение.

В алгоритме, описанном в [2], применяется рекурсивная схема перебора различных вариантов дерева, в которой последовательно объединяются вершины одного яруса. Используется модификация критерия качества, в котором требуемое число кластеров не задано, и ищется некоторый компромисс между суммарным объемом и числом групп («регуляризующий» критерий): $Q_R(G) = \sum\limits_{k=1}^{K} V^{(k)} + \alpha \frac{K}{N}$, где α — некоторый эвристический параметр. Экспериментальные исследования показали, что существует диапазон значений данного параметра (обычно задается $\alpha \approx 1$), в котором решения обладают приемлемым качеством.

Предлагаемый критерий

В рассмотренных выше критериях качества группировки $Q(G)$, $Q_R(G)$ не учитывается состав групп. Это может приводить к тому, что предпочтение при прочих равных условиях будет отдаваться кластерам, состоящим из небольшого числа объектов. Рассмотрим другой критерий качества группировки, использующий расстояние Кульбака–Лейблера между распределением вероятности попадания в таксоны и равномерным распределением. Определим «пустую» (или «шумовую») область $T^{(0)} = D \backslash \{T^{(1)} \cup \cdots \cup T^{(k)}\}$. Расстояние Кульбака–Лейблера определяется как

$$\rho_{\mathrm{KL}} = \sum_{k=0}^{K} \mathsf{P}(x \in T^{(k)}) \ln \frac{\mathsf{P}(x \in T^{(k)})}{\mathsf{P}_u(x \in T^{(k)})},$$

где для области $T^{(0)}$ выполняется $\mathsf{P}_u(x \in T^{(0)}) = 1 - \sum\limits_{k=1}^{K} V^{(k)}$. Обозначим критерий, основанный на указанном расстоянии, как $Q_{\mathrm{KL}}(G)$.

Для оценивания вероятностей попадания в подобласти можно использовать соответствующие частоты. Однако такие оценки будут обладать большой погрешностью при условии высокой размерности задачи и сравнительно малого числа объектов. Для повышения точности оценок можно дополнительно привлекать априорные знания о классе распределений, которые могут быть в распоряжении исследователя. Будем использовать разработанную ранее байесовскую модель классификации по конечному множеству событий [2], в которой на множестве состояний природы задается априорное распределение в соответствии с экспертной информацией.

Рассмотрим дискретную случайную переменную X с множеством неупорядоченных значений $D_X = \{u^{(0)}, \ldots, u^{(K)}\}$, где $u^{(k)}$ — k-е значение (ячейка), соответствующая области $T^{(k)}$, $k = 0, \ldots, K$. Для удобства, закодируем значения переменной X через номера ячеек. Пусть $p^{(k)}$ — вероятность события «$X = k$», $k = 0, \ldots, K$. Пусть $n^{(k)}$ — число наблюдений, соответствующих k-й ячейке (заметим, что $n^{(0)} = 0$, если предполагать отсутствие «шума»). Обозначим наблюдаемый вектор частот через $\mathbf{s} = (n^{(0)}, \ldots, n^{(K)})$. Пусть S обозначает случайный вектор частот, который подчиняется полиномиальному распределению с вектором параметров $\theta = (p^{(0)}, \ldots, p^{(K)})$. Рассмотрим семейство полиномиальных моделей распределения с множеством параметров $\Lambda = \{\theta\}$. Это семейство будем также называть множеством возможных состояний природы.

Используем байесовский подход: *предположим, что на* Λ *определена случайная величина* $\Theta = (P^{(0)}, \ldots, P^{(K)})$ *с некоторым известным априорным распределением* $p(\theta)$ при $\theta \in \Lambda$. Будем полагать, что Θ подчиняется распределению Дирихле, $\Theta \sim \mathrm{Dir}(\mathbf{d})$, где $\mathbf{d} = \{d^{(0)}, \ldots, d^{(K)}\}$, $d^{(k)} > 0$ — некоторые заданные вещественные числа, выражающие экспертные знания о распределении Θ. При отсутствии знаний об априорных предпочтениях на множестве распределений, можно использовать равномерное априорное распределение $\mathbf{d} = 1$.

Рассмотрим энтропию распределения как функцию от θ: $H(\theta) = -\sum\limits_{k=0}^{K} p^{(k)} \ln p^{(k)}$. Назовем ожидаемой энтропией априорного распределения величину математического ожидания $\bar{H} = \mathsf{E}_\Theta H(\Theta)$.

Утверждение 1. *Ожидаемая энтропия равна*

$$\bar{H} = \psi(D+1) - \sum_{k=0}^{K} \frac{d^{(k)}}{D} \psi(d^{(k)} + 1),$$

где $\psi(z) = \frac{d}{dz} \ln \Gamma(z)$ *— ди-гамма функция (известно, что при больших* z *выполняется* $\psi(z) \approx \ln(z)$*).*

По свойству распределения Дирихле, апостериорное распределение $\Theta \,|\, \mathbf{s} \sim \mathrm{Dir}\,(\mathbf{d} + \mathbf{s})$. Назовем ожидаемой энтропией апостериорного распределения величину математического ожидания энтропии $\bar{H}_{\mathbf{s}} = \mathsf{E}_{\Theta \,|\, \mathbf{s}} H(\Theta)$, где усреднение проводится по всем состояниям природы, в соответствии с апостериорным распределением.

Утверждение 2. *Ожидаемая энтропия апостериорного распределения равна*

$$\bar{H}_{\mathbf{s}} = \psi(D+N+1) - \sum_{k=0}^{K} q^{(k)}\psi(d^{(k)}+n^{(k)}+1),$$

где $q^{(k)} = \frac{d^{(k)}+n^{(k)}}{D+N}$, $k = 0,\ldots,K$.

Величины $q^{(k)}$ можно трактовать как байесовские оценки вероятности попадания в подобласти.

Рассмотрим расстояние Кульбака–Лейблера как функцию от состояния природы θ:

$$\rho_{\mathrm{KL}}(\theta) = \sum_{k=0}^{K} p^{(k)} \ln \frac{p^{(k)}}{V^{(k)}}.$$

Утверждение 3. *Апостериорное математическое ожидание* $\mathsf{E}_{\Theta|s}\rho_{\mathrm{KL}}(\Theta \mid s)$ *определяется следующим выражением:*

$$\mathsf{E}_{\Theta \mid s}\rho_{\mathrm{KL}}(\Theta \mid s) = -\Big(\bar{H}_s + \sum_{k=0}^{K} q^{(k)} \ln V^{(k)}\Big).$$

Величину $\mathsf{E}_{\Theta \mid s}\rho_{\mathrm{KL}}(\Theta \mid s)$ назовем байесовской оценкой расстояния Кульбака–Лейблера между указанными выше распределениями (заметим, что апостериорное математическое ожидание является оптимальной байесовской оценкой при квадратичной функции потерь). Будем использовать байесовскую оценку (с противоположным знаком) как критерий качества группировки.

При большой размерности пространства переменных величина $\ln V^{(0)} \approx 0$, поэтому, с точностью до постоянных, критерий принимает вид

$$Q_{\mathrm{BKL}}(G) = \sum_{k=1}^{K} q^{(k)}\big(\ln V^{(k)} - \psi(d^{(k)}+n^{(k)}+1)\big).$$

При минимизации критерия достигается определенный компромисс между стремлением сформировать таксоны минимального объема и получить кластеры, содержащие как можно больше объектов.

Статистическое моделирование

Разработан полигон статистического моделирования, в котором проводится многократное решение различного типа задач кластерного анализа. Каждый тип задач характеризуется такими свойствами, как: число классов; объем выборки для каждого класса; размерность пространства; число качественных переменных m^*; число «шумовых» переменных $\tilde{m}$; интервал изменения переменных (число имен); вид «базового» распределения.

Базовое распределение для каждого из классов выбрано многомерным нормальным с ковариационной матрицей Σ. Вектор математических ожиданий для каждого класса выбирается случайно из множества целых значений переменных (так, чтобы для различных классов эти значения не совпадали). Для качественных переменных проводится округление значений полученных реализаций до ближайшего целого. Ковариационная матрица Σ задается двумя параметрами: значением

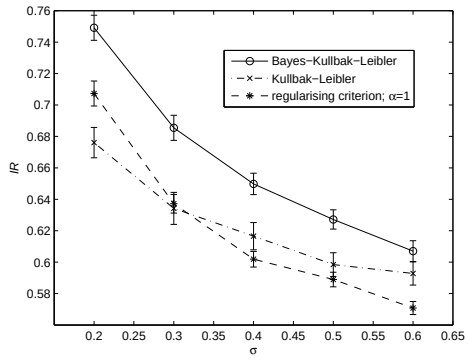


Рис. 1. Пример результатов моделирования ($K = 2$, $n^{(1)} = n^{(2)} = 25$, $m = 10$, $m^* = 5$, $\tilde{m} = 0$, $\sigma' = 0{,}5$).

диагональных элементов σ, и значением недиагональных элементов $\pm\sigma'$ (знак выбирается случайно). Для «шумовых» переменных задается дисперсия, много больше σ.

Для оценивания точности алгоритма используется многократная процедура, состоящая из следующих шагов: а) генерирование различных типов задач, а также видов распределений из заданного множества; б) получение случайных выборок в соответствии с назначенным распределением; в) построение, с помощью исследуемого алгоритма, группировочного решения для каждой выборки (естественно, истинные номера классов алгоритму не сообщаются); г) нахождение усредненного по всем выборкам показателя точности, а также соответствующего доверительного интервала.

Точность группировки определяется с помощью индекса Ранда *IR*, представляющего собой относительное число пар объектов, у которых либо одинаковые, либо разные номера классов в полученной и истинной группировке (значение индекса, близкое к 1, говорит о хорошей согласованности группировок). На выходе полигона указываются оценки точности исследуемого алгоритма для рассмотренных типов задач.

Исследовалось поведение алгоритма для трех описанных выше критериев качества: регуляризующего Q_R; основанного на расстоянии Кульбака–Лейблера Q_{KL}; его байесовской модификации Q_{BKL} с $\mathbf{d} = \mathbf{1}$. Процедура статистического моделирования для каждого случая повторяется 200 раз. Один из примеров полученных результатов (зависимость усредненного индекса Ранда от параметра σ) приведен на рис. 1.

В проведенных экспериментах, характеризуемых малым объемом выборки, несбалансированностью классов, наличием зависимости между переменными, алгоритм, основанный на критерии Q_{BKL}, чаще других оказывался более точным. Критерий Q_R в некоторых случаях показывал себя лучше остальных, однако его применение требует правильного подбора регуляризующего параметра α.

Можно сделать вывод о целесообразности использования ансамбля деревьев решений [1], в котором сочетаются преимущества различных алгоритмов.

Модель ансамбля

Предположим, что имеется некоторая скрытая (непосредственно ненаблюдаемая) переменная Y, которая задает принадлежность каждого объекта к некоторому из $K \geqslant 2$ классов («пустую» область здесь не рассматриваем). Каждый класс характеризуется определенным законом условного распределения $p(x \,|\, Y{=}k) = p_k(x),\ k = 1, \ldots, K$. Рассмотрим следующую вероятностную модель генерации данных. Пусть для каждого объекта определяется класс, к которому он относится, в соответствии с априорными вероятностями $p^{(k)},\ k = 1, \ldots, K$. Затем в соответствии с распределением $p_k(x)$ определяется значение x. Указанная процедура проводится независимо для каждого объекта.

Рассмотрим произвольную пару a, b различных объектов выборки. Обозначим соответствующие наблюдения через x_a и x_b. Пусть $Z = \mathbb{I}\big(Y(a) \neq Y(b)\big)$, где $\mathbb{I}(\cdot)$ — индикаторная функция. Обозначим $P_Z = \mathsf{P}(Z = 1 \,|\, x_a, x_b)$ — вероятность принадлежности x_a, x_b к различным классам.

Пусть с помощью некоторого «базового» алгоритма кластерного анализа μ может быть построено разбиение множества объектов на группы. Поскольку нумерация кластеров не играет роли, удобнее рассматривать отношение эквивалентности, т. е. указывать, относит ли алгоритм μ каждую пару объектов в один и тот же класс, либо в разные классы. Пусть $h_{\mu,\,a,b} = \mathbb{I}\big(\mu(a) \neq \mu(b)\big)$.

Рассмотрим *модель ансамблевой классификации*. Предположим, что алгоритм μ рандомизирован, т. е. зависит от случайной величины Ω из некоторого допустимого множества значений («условий обучения»): $\mu = \mu(\Omega)$. В дальнейшем будем обозначать $h_{\mu(\Omega),\,a,\,b} = h(\Omega)$. Предположим, что $\mathsf{P}\big(h(\Omega){=}1 \,|\, Z{=}1\big) = \mathsf{P}\big(h(\Omega){=}0 \,|\, Z{=}0\big) = q$, т.е. условные вероятности правильного решения (либо разделения, либо объединения объектов) совпадают. Можно сказать, что величина q отражает *стабильность* работы алгоритма в различных условиях.

Обозначим $P_h = \mathsf{P}\big(h(\Omega){=}1\big)$. Данная величина выражает *однородность* решений алгоритма (P_h, близкое к 0 или 1 означает высокую однородность). Заметим, что $P_h = \mathsf{P}\big(h(\Omega){=}1 \,|\, Z{=}1\big)P_Z + \mathsf{P}\big(h(\Omega){=}1 \,|\, Z{=}0\big)(1 - P_Z) = qP_Z + (1-q)(1-P_Z)$.

Пусть в результате L-кратного применения алгоритма μ получен набор случайных, условно независимых решений $h(\Omega_1), \ldots, h(\Omega_L)$: $\mathsf{P}\big(h(\Omega_{i_1}), \ldots, h(\Omega_{i_j}) \,|\, Z{=}z\big) = \mathsf{P}\big(h(\Omega_{i_1}) \,|\, Z{=}z\big) \times \ldots \times \mathsf{P}\big(h(\Omega_{i_j}) \,|\, Z{=}z\big)$, где $\Omega_{i_1}, \ldots, \Omega_{i_j}$ — произвольный набор условий обучения, $z \in \{0, 1\}$ (будем считать, что L нечетно). Обозначим $P_{h,h} = \mathsf{P}\big(h(\Omega'){=}1,\ h(\Omega''){=}1\big)$, где Ω', Ω'' имеют то же распределение, что Ω и $(\Omega' \neq \Omega'')$. Заметим, что $P_{h,h} = q^2 P_Z + (1-q)^2(1-P_Z)$. Обозначим $\bar{h} = \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L} h(\Omega_l)$. *Коллективным (ансамблевым) решением* для a, b по большинству голосов будем называть функцию $A\big(h(\Omega_1), \ldots, h(\Omega_L)\big) = \mathbb{I}[\bar{h} > \frac{1}{2}]$. Рассмотрим *отступ* ансамбля (*margin*) [3]: $\mathrm{mg} = \frac{1}{L}\{\text{число голосов за } z - \text{число голосов против } z\}$, $z \in \{0, 1\}$. Можно показать, что отступ равен $\mathrm{mg} = \mathrm{mg}(Z, \bar{h}) = (2Z-1)(2\bar{h}-1)$. Вероятность ошибки для ансамбля $P_{\mathrm{err}} = \mathsf{P}_{Z,\Omega_1,\ldots,\Omega_L}\big(\mathrm{mg}(Z,\bar{h}) < 0\big)$. Из неравенства Чебышева следует $\mathsf{P}(U{<}0) < \frac{\mathsf{D}U}{(\mathsf{E}U)^2}$, где $\mathsf{E}U$ — математическое ожидание, $\mathsf{D}U$ — дисперсия величины U (требуется, чтобы выполнялось $\mathsf{E}U > 0$). Таким образом, при $\mathsf{E}\,\mathrm{mg}(Z,\bar{h}) > 0$

$$\mathsf{P}_{Z,\Omega_1,\ldots,\Omega_L}\big(\mathrm{mg}(Z,\bar{h}) < 0\big) < \frac{\mathsf{D}\,\mathrm{mg}(Z,\bar{h})}{\big(\mathsf{E}\,\mathrm{mg}(Z,\bar{h})\big)^2}.$$

Утверждение 4. *Математическое ожидание и дисперсия отступа равны:* $\mathsf{E}\,\mathrm{mg}(Z,\bar{h}) = 2q - 1$, $\mathsf{D}\,\mathrm{mg}(Z,\bar{h}) = \frac{4}{L}\,(P_h - P_{h,h})$.

Таким образом, требование $\mathsf{E}\,\mathrm{mg}(Z,\bar{h}) > 0$ выполняется, если $q > 0{,}5$. Заметим, что величины P_h и $P_{h,h}$ могут быть оценены по выходам ансамбля.

Рассмотрим коэффициент корреляции $\rho = \rho_{h(\Omega'),h(\Omega'')} = \frac{P_{h,h} - P_h^2}{P_h(1-P_h)}$. Так как $P_h - P_{h,h} = P_h - P_h^2 + P_h^2 - P_{h,h}$, то $\mathsf{D}\left(m(Z,\bar{h})\right) = \frac{4}{L}(1-\rho) \times \times P_h(1-P_h)$. Заметив, что $P_h - P_{h,h} = q(1-q)$, после необходимых преобразований получим следующую верхнюю границу для вероятности ошибки:

$$P_{\mathrm{err}} < \frac{1}{L}\left(\frac{1}{1 - 4(1-\rho)\,\mathsf{P}_h(1-\mathsf{P}_h)} - 1\right).$$

Хотя эта граница и не очень точна в силу относительно высокой погрешности неравенства Чебышева, полученное выражение дает возможность сделать некоторые качественные выводы. А именно, если верны предположения модели и $q > 0{,}5$, то при прочих равных условиях выполняется:

- вероятность ошибки стремится к нулю при увеличении размера ансамбля;
- большая однородность ансамбля и высокая корреляция между его выходами снижает вероятность ошибки.

Литература

[1] *Berikov V.* Construction of the ensemble of logical models in cluster analysis // Lecture Notes in Artificial Intelligence, LNAI 5755. — 2009. — Pp. 581–590.

[2] *Лбов Г. С., Бериков В. Б.* Устойчивость решающих функций в задачах распознавания образов и анализа разнотипной информации. — Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2005. — 218 с.

[3] *Breiman L.* Random Forests // Machine Learning. — 2001. — Vol. 45, No. 1. — Pp. 5—32.

Выявление зависимости между величиной FRiS-функции и вероятностью ошибочного распознавания*

Борисова И. А.
biamia@mail.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН

Функция конкурентного сходства (FRiS-функция) на протяжении нескольких лет успешно используется в процессе разработки эффективных алгоритмов решения различных задач Интеллектуального Анализа Данных. В данной работе предпринимается попытка аналитически обосновать ее эффективность, продемонстрировав наличие зависимости между значением FRiS-функции для некоторого объекта и вероятностью ошибочного распознавания этого объекта. Полученная зависимость обладает универсальным характером, что позволяет использовать ее для задач с различным характером распределения образов.

Determination of functional dependence between FRiS-function and recognition error probability*

Borisova I. A.
Sobolev institute of mathematics SB RAS, Novosibirsk, Russia

Function of rival similarity (FRiS-function) is successfully used for constructing of different Data Mining algorithms. In this paper first attempt to substantiate efficiency of idea of rival similarity by determining dependence between value of FRiS-function for a sample and misrecognized probability for this sample.

Исторически сложилось, что в области анализа данных, как и во многих других прикладных областях, часто новые методы разрабатываются на основе неких эвристических предположений и в силу сложности анализируемых моделей долгое время не имеют строгого научного обоснования. Такие методы сначала доказывают свою эффективность успешно решая реальные задачи. Строгие математические доказательства их работоспособности появляются позднее.

Так, например, для правила ближайшего соседа, изначально основанного на эвристической гипотезе локальной компактности, со временем было доказано, что с ростом объема выборки оно обеспечивает ошибку распознавания, не больше чем в два раза превышающую Байесову ошибку [1].

Методика измерения сходства между объектами, учитывающая конкурентную ситуацию [2], также начала использоваться при разработке алгоритмов анализа данных, не будучи должным образом обоснованной теоретически. Однако, это не помешало ей оказаться эффективным базовым элементом, позволяющим оценивать компактность образов, с одной стороны, и ожидаемую надежность распознавания, с другой. Благодаря этим особенностям функция конкурентного сходства легла в основу алгоритмов выбора информативных систем признаков, построения решающего правила, таксономии, прогнозирования и некоторых других. Описания алгоритмов и результаты их использования при решении реальных и модельных задач опубликованы в следующих работах [2, 3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №08-01-00040.

В данной статье приводятся некоторые результаты теоретического исследования свойств FRiS-функции в статистической постановке задачи распознавания, а именно выявления связи между вероятностью ошибочного распознавания объекта и величиной FRiS-функции у него.

Функция конкурентного сходства

Понятие функции конкурентного сходства возникло из идеи, что для оценки близости между объектами необходимо учитывать конкурентную ситуацию. Так, при распознавании двух образов, для оценки конкурентного сходства объекта z с первым образом необходимо учитывать не только расстояние r_1 от z до этого образа, но и расстояние r_2 до ближайшего конкурирующего образа (в случае двух образов это будет расстояние от z до второго образа).

Нормированная величина конкурентного сходства при этом вычисляется по следующей формуле:

$$F(z) = \frac{r_2 - r_1}{r_2 + r_1}.$$

Значения FRiS-функции меняются в пределах от -1 до $+1$. Если контрольный объект z совпадает с объектом первого образа, то $r_1 = 0$ и $F(z) = 1$. При расстояниях $r_1 = r_2$ значение $F(z) = 0$. Это значит, что объект z одинаково похож (и не похож) на оба образа и лежит на границе между ними. Если же контрольный объект z совпадает с объектом второго образа, то $r_2 = 0$ и $F(z) = -1$.

Определенная таким способом функция конкурентного сходства хорошо согласуется с механизмами восприятия сходства и различия, которыми

пользуется человек. Кроме того она оказалась эффективным инструментом для оценки компактности разбиения выборки на образы и для оценки ожидаемой ошибки распознавания.

Далее функция конкурентного сходства рассматривается как случайная величина, и исследуется вопрос, как ведут себя ее статистические характеристики с ростом объема обучающей выборки.

FRiS-функция в статистической постановке задачи распознавания

Рассматривается задача распознавания двух образов в простейшем одномерном случае. Предполагается, что априорные вероятности появления объектов первого и второго образа равны. Пусть $p(z\,|\,1) = p_1(z)$ — плотность распределения первого образа, а $p(z\,|\,2) = p_2(z)$ — плотность распределения второго образа.

Рассматривается случай, когда первый образ представлен n независимыми реализациями $x_1, \ldots, x_n$, а второй образ — n независимыми реализациями $y_1, \ldots, y_n$. Функция конкурентного сходства в простейшем случае зависит от расстояний от объекта z до ближайшего представителя своего образа и образа-конкурента. Потому будем рассматривать случайные величины

$$r_1(z) = \min_{i=1,\ldots,n} |z - x_i|, \quad r_2(z) = \min_{i=1,\ldots,n} |z - y_i|,$$

соответствующие этим расстояниям. Если $p_1(z) \neq 0$ и $p_2(z) \neq 0$, то с ростом n величины $r_1(z)$ и $r_2(z)$ стремятся к нулю, так как ближайший сосед оказывается все ближе к z. Потому при вычислении FRiS-функции будут использоваться не сходящиеся к нулю аналоги расстояний $\widetilde{r_1}(z) = nr_1(z)$ и $\widetilde{r_2}(z) = nr_2(z)$. Следующее утверждение позволяет вычислять плотности $p_{\widetilde{r_j}(z)}(t),\ j = 1, 2$ этих случайных величин.

Утверждение 1. *Если функция $p_j(z)$ непрерывна и не равна нулю в окрестности z, то при $n \to \infty$*

$$p_{\widetilde{r_j}(z)}(t) \to \begin{cases} 2p_j(z)e^{-2tp_j(z)}, & \text{если } t > 0; \\ 0, & \text{если } t \leqslant 0. \end{cases} \qquad (1)$$

Далее будем считать, что число объектов n в выборке достаточно велико, и в качестве приближенных значений плотности для $\widetilde{r_1}(z)$ и $\widetilde{r_2}(z)$ можно использовать предельные величины, полученные по формуле (1).

Теперь мы можем перейти к рассмотрению выборочной случайной величины

$$F(z) = \frac{r_2(z) - r_1(z)}{r_2(z) + r_1(z)} = \frac{\widetilde{r_2}(z) - \widetilde{r_1}(z)}{\widetilde{r_2}(z) + \widetilde{r_1}(z)},$$

соответствующей функции конкурентного сходства.

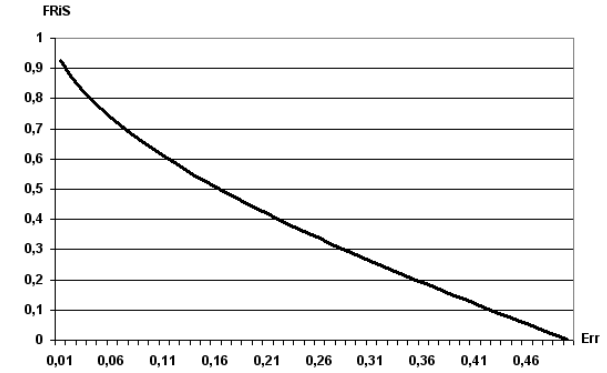


Рис. 1. Зависимость ожидаемой величины FRiS-функции от вероятности ошибки.

Утверждение 2. *Если функции $p_1(z)$ и $p_2(z)$ непрерывны и не равна нулю в окрестности z, то при $n \to \infty$*

$$p_{F(z)}(t) \to \begin{cases} \frac{2p_1(z)p_2(z)}{\left((1+t)p_2(z)+(1-t)p_1(z)\right)^2}, & 1 < t < 1; \\ 0, & \textit{иначе}\ ; \end{cases}$$

$$\mathsf{E}F(z) \to \frac{2p_1(z)\,p_2(z)\ln\frac{p_2(z)}{p_1(z)}}{\big(p_1(z) - p_2(z)\big)^2} + \frac{p_1(z) + p_2(z)}{p_1(z) - p_2(z)}. \quad (2)$$

Предположим, что в точке z $p_1(z) \geqslant p_2(z)$. В этих условиях Байесов классификатор отнесет объект z к первому образу, а вероятность неправильного распознавания в этом случае определяется выражением

$$\mathrm{Err} = \frac{p_2(z)}{p_1(z) + p_2(z)}.$$

Подставляя его в формулу (2) получим в явном виде зависимость между ожидаемым значением функции конкурентного сходства и вероятностью ошибочного распознавания объекта для выборок большого объема:

$$\mathsf{E}F \approx \frac{2\mathrm{Err}(1 - \mathrm{Err})\ln\frac{\mathrm{Err}}{1-\mathrm{Err}}}{(1 - 2\mathrm{Err})^2} + \frac{1}{1 - 2\mathrm{Err}}. \quad (3)$$

Данная зависимость является универсальной и не зависит от характера распределения образов. На Рис. 1 приводится график полученной зависимости. Эксперименты на простых модельных задачах подтверждают его корректность.

Использование значения FRiS-функции для прогнозирования надежности распознавания

Одним из недостатков эвристических алгоритмов является сложность предсказания точности их работы на новых данных [4]. Для вычисления оценки ожидаемой надежности распознавания в таких

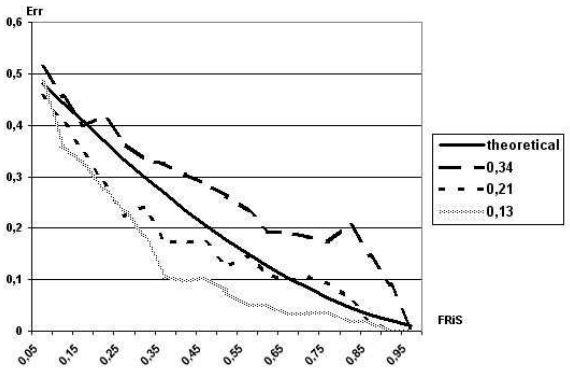


Рис. 2. Оценочные зависимости между величиной FRiS-функции и вероятностью ошибочного распознавания для серии задач с разной средней вероятностью ошибочного распознавания (эта величина указана в качестве имен кривых)

случаях используется доля правильно распознанных объектов независимой тестовой выборки, либо усреднение этой величины в режим перекрестной проверки (Cross Validation). Однако и в том и в другом случае получаемая величина характеризует ожидаемую надежность распознавания в среднем, сильно загрубляя ее для каждого конкретного объекта.

В [2] кратко описан подход, позволяющий в предположении о наличии зависимости между величиной FRiS-функции и ошибки распознавания, восстанавливать ее методом Cross Validation для конкретной выборки. При этом анализируемая выборка случайным образом делилась на обучающую и тестовую. И для всех тестовых объектов определялись величины FRiS-функции. Эксперимент повторялся до тех пор, пока не набиралась некоторая статистика. Затем интервал изменения значений функции конкурентного сходства для контрольных объектов $[0, 1]$ делился на подынтервалы $[0, F_1)$, $[F_1, F_2)$, $\ldots$, $[F_{n-1}, 1]$, и все объекты из набранной статистики распределялись между ними. Объект z относился к интервалу i, если $F(z) \in [F_{i-1}, F_i)$. Для каждого интервала вычислялась доля ошибочно распознанных контрольных объектов относительно общего числа объектов, попавших в него. Полученная в результате гистограмма и была использована в качестве оценки зависимости между величиной FRiS-функции $F(z)$ и вероятностью ошибочного распознавания z. Полученные в результате зависимости носили локальный характер, так как отличались от задачи к задаче.

На Рис. 2 приводится вид этих зависимостей для серии задач, имеющих сходную природу (два образа представлены унимодальными распределениями), но отличающихся друг от друга средней надежностью распознавания (что достигается изменением расстояния между центрами мод конкурирующих образов при фиксированных матрицах ковариаций). Обучающая выборка в этом эксперименте содержала 200 объектов. Глядя на зависимости, полученные на конечных выборках, нетрудно заметить, что они сильно зависят от специфики решаемой задачи. Это может быть объяснено тем, что при восстановлении зависимости между FRiS-функцией и вероятностью ошибки по конкретной выборке вычислялось не среднее значение FRiS-функции, а среднее значение вероятности ошибки, при этом усреднение производилось не по всем возможным значениям FRiS-функции, а лишь по тем из них и в той пропорции, в которой они были представлены в анализируемой задачи. Таким образом, использование полученной зависимости было оправдано только в рамках конкретной задачи, при этом результаты не могли быть обобщены и распространены на реальные задачи неизвестной природы, объема которых не хватало для построения требуемой гистограммы.

Выводы

В данной работе показана связь между величиной конкурентного сходства и вероятностью ошибочного распознавания в простейшем одномерном случае. Полученная зависимость носит универсальный характер и , в отличии от ранее использованной методики, может использоваться для задач различной природы независимо от объема выборки.

Таким образом сделан первый шаг на пути аналитического изучения свойств функций конкурентного сходства, что, с одной стороны, должно повысить уровень доверия к результатам работы алгоритмов, основанных на них, а с другой, возможно, улучшить качество работы этих алгоритмов.

Литература

[1] *Дуда Р., Харт П.* Распознавание образов и анализ сцен. — Москва: Издательство «Мир», 1976. — 512 с.

[2] *Zagoruiko N. G., Borisova I. A., Dyubanov V. V., Kutnenko O. A.* Methods of Recognition Based on the Function of Rival Similarity // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2008. — Vol. 18. — Pp. 1–6.

[3] *Богданов А. Б., Борисова И. А., Дюбанов В. В., Загоруйко Н. Г., Кутненко О. А., Кучкин А. В., Мещеряков М. А., Миловзоров Н. Г.* Интеллектуальный анализ спектральных данных // Автометрия. — 2009. № 1. — С. 92–101.

[4] *Воронцов К. В.* Обзор современных исследований по проблеме качества обучения алгоритмов // Таврический вестник информатики и математики. — 2004. — № 1. — С. 5–24.

Точные оценки вероятности переобучения для несимметричных многомерных семейств алгоритмов*

Ботов П. В.
pbotov@forecsys.ru
Долгопрудный, Московский физико-технический институт (государственный университет)

Данная статья посвящена развитию методов модельных семейств алгоритмов, наиболее приближенных к реальным семействам, с дальнейшей целью получения по ним точных оценок вероятности переобучения. Рассмотрены несимметричные многомерные монотонная сетка, связка цепочек и унимодальная сетка. Для всех трёх семейств алгоритмов выведены теоремы о вероятности переобучения.

Exact bounds on probability of overfitting for asymmetric multidimensional sets of algorithms*

Botov P. V.
Moscow Institute of Physics and Technology (State University), Dolgoprudny, Russia

This article is devoted to the development of methods of model families of algorithms, closest to the real families, with a further purpose of obtaining accurate estimates of the probability of overfitting. We consider asymmetric multidimensional monotone set, chain pencil and unimodal set. For all three families of algorithms are derived theorems on probability of overfitting.

Введение

Комбинаторная теория обобщающей способности в настоящее время позволяет получать точные (не асимптотические и не завышенные) оценки вероятности переобучения, главным образом, для модельных семейств алгоритмов. В [5] такие оценки были получены для монотонных и унимодальных цепочек алгоритмов, единичной окрестности лучшего алгоритма, слоёв и интервалов булева куба, пары алгоритмов; в [3] — для связки монотонных цепочек; в [2] — для хэммингова шара и некоторых его подмножеств, в [1] — для многомерных монотонных и унимодальных сеток алгоритмов.

Модельные семейства вряд ли могут порождаться практическими задачами. Тем не менее, они интересны тем, что обладают свойствами расслоения и связности, благодаря которым переобучение существенно понижается, и которыми с необходимостью должны обладать реальные семейства, чтобы их можно было применять на практике [4].

Некоторые модельные семейства (сетки и связки) обладают также свойством «размерности» или «числа степеней свободы», что ещё больше сближает их с реальными семействами. В [1] было показано, что вероятность переобучения нейронных сетей, решающих деревьев, байесовских классификаторов на реальных задачах классификации неплохо приближается вероятностью переобучения многомерной монотонной сетки при соответствующем подборе её размерности.

Работа поддержана РФФИ (проект №08-07-00422) и программой ОМН РАН «Алгебраические и комбинаторные методы математической кибернетики и информационные системы нового поколения».

Сетки и связки, рассматривавшиеся ранее, являлись симметричными в том смысле, что все размерности давали равный вклад в оценку вероятности переобучения. В данной работе предлагается обобщение этих многомерных модельных семейств. Вводится ограничение на максимальную высоту D_i по каждой i-й размерности. Интуитивно, этот параметр показывает, насколько «богата» данная размерность; точнее — сколько алгоритмов, различимых на генеральной совокупности, можно получить, варьируя вектор параметров семейства вдоль i-й размерности. Такое обобщение ещё больше приближает модельные семейства к реальным.

Основные понятия и обозначения

Задано множество объектов $\mathbb{X} = \{x_1, \ldots, x_L\}$, называемое *генеральной выборкой*, конечное множество A, элементы которого называются *алгоритмами*, и бинарная функция ошибки $I\colon A \times \mathbb{X} \to \to \{0, 1\}$. Если $I(a, x) = 1$, то алгоритм a ошибается на объекте x, иначе a не ошибается на x.

Вектором ошибок алгоритма a называется бинарный вектор $\big(I(a, x_i)\big)_{i=1}^{L}$.

Число ошибок алгоритма a на выборке $X \subseteq \mathbb{X}$ есть $n(a, X) = \sum\limits_{x \in X} I(a, x)$.

Частота ошибок алгоритма a на выборке $X \subseteq \mathbb{X}$ есть $\nu(a, X) = \frac{1}{|X|} n(a, X)$.

Подмножество $A_t = \{a \in A\colon n(a, \mathbb{X}) = t + m\}$ называется t-*слоем* множества алгоритмов A относительно выборки $\mathbb{X}$, где m — число ошибок *лучшего алгоритма*, $m = \min\limits_{a \in A} n(a, \mathbb{X})$.

Методом обучения называется отображение $\mu\colon 2^{\mathbb{X}} \to A$, которое произвольной обучающей выборке X ставит в соответствие некоторый алгоритм $a = \mu X$ из A. Метод обучения μ называ-

ется методом минимизации эмпирического риска (МЭР), если для любой обучающей выборки X

$$\mu X \in A(X), \quad A(X) = \operatorname{Arg}\min_{a\in A} n(a, X).$$

Если множество $A(X)$ содержит более одного алгоритма, то будем полагать, что реализуется худший случай. Метод МЭР называется *пессимистическим* (ПМЭР), если

$$\mu X \in \operatorname{Arg}\max_{a\in A(X)} n(a, \mathbb{X}).$$

Допустим, что все C_L^ℓ разбиений генеральной выборки $\mathbb{X} = X \sqcup \bar{X}$ на наблюдаемую обучающую выборку X длины ℓ и скрытую контрольную выборку $\bar{X}$ длины $k = L - \ell$ равновероятны.

Нашей основной задачей будет вычисление вероятности переобучения для ПМЭР:

$$Q_\varepsilon = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{X\sqcup\bar{X}} \big[\nu(\mu X, \bar{X}) - \nu(\mu X, X) \geqslant \varepsilon\big].$$

Вектор $\boldsymbol{d} = (d_i)_{i=1}^h$ с целыми неотрицательными компонентами будем называть *неотрицательным вектором индексов*. Положим $|\boldsymbol{d}| = \sum\limits_{i=1}^h |d_i|$. На множестве таких векторов введём частичный порядок: $\boldsymbol{d} < \boldsymbol{d}'$ тогда и только тогда, когда $d_i \leqslant d'_i$ для всех $i \in 1, \ldots, h$, и хотя бы одно из неравенств строгое.

Базовые гипотеза и леммы

Согласно гипотезе [5] о порождающих и запрещающих множествах условие $[\mu X = a]$ выражается через сумму элементов вида $[X_{av} \in X][X'_{av} \in \bar{X}]$. В настоящей работе вводится гипотеза, более удобная в случае многомерных семейств.

Гипотеза 1. Для каждого t-слоя A_t можно указать такое множество индексов V_t, и для каждого индекса $v \in V_t$ *порождающее* множество $X_{tv} \subset \mathbb{X}$, непересекающееся с ним *запрещающее* множество $X'_{tv} \subset \mathbb{X}$ и коэффициент $c_{tv} \in \mathbb{Z}$, такие, что

$$[\mu X \in A_t] = \sum_{v\in V_t} c_{tv}[X_{tv} \subseteq X][X'_{tv} \subseteq \bar{X}], \qquad (1)$$

причём $n(a, X_{tv}) = 0$ и $n(a, X'_{tv}) = t$ для всех $a \in A_t$.

Лемма 1. *Если гипотеза 1 верна, то вероятность переобучения есть $Q_\varepsilon = \sum_{t=0}^k Q_{\varepsilon,t}$, где $Q_{\varepsilon,t}$ — вклад t-слоя в вероятность переобучения:*

$$Q_{\varepsilon,t} = \sum_{v\in V_t} c_{tv} \frac{C_{L_{tv}}^{\ell_{tv}}}{C_L^\ell} H_{L_{tv}}^{\ell_{tv},m}(s_t(\varepsilon)),$$

где $L_{tv} = L - |X_{tv}| - |X'_{tv}|$, $\ell_{tv} = \ell - |X_{tv}|$, $s_t(\varepsilon) = \frac{\ell}{L}(m + t - \varepsilon k)$, $H_L^{\ell,m}(z)$ — функция гипергеометрического распределения:

$$H_L^{\ell,m}(z) = \sum_{s=s_0}^{\lfloor z\rfloor} \frac{C_m^s C_{L-m}^{\ell-s}}{C_L^\ell}, \quad s_0 = \max\{0, m-k\}.$$

Монотонная сетка алгоритмов

Определение 1. *Множество алгоритмов $A = \{a_{\boldsymbol{d}} \colon \boldsymbol{d} \leqslant \boldsymbol{D},\ |\boldsymbol{d}| < D_0\}$, задаваемое неотрицательным вектором высот $\boldsymbol{D}$ и общей высотой D_0, называется монотонной h-мерной сеткой алгоритмов, если выполнены условия:*

1) *если $\boldsymbol{d} < \boldsymbol{d}'$, то для всех $x_i \in \mathbb{X}$ выполнено $I(a_{\boldsymbol{d}}, x_i) \leqslant I(a_{\boldsymbol{d}'}, x_i)$, причём ровно $|d - d'|$ неравенств строгие;*
2) *$n(a_{\boldsymbol{d}}, \mathbb{X}) = m + |\boldsymbol{d}|$ при некотором $m \geqslant 0$ для всех $a_{\boldsymbol{d}} \in A$. Алгоритм $a_{\boldsymbol{0}}$ называется лучшим.*

Из определения следует, что все объекты $x \in \mathbb{X}$ можно отнести к одной из трёх категорий:

1) *шумовые объекты*, на которых любой алгоритм из A ошибается; их ровно m;
2) *безошибочные*, на которых ни один из алгоритмов из A не ошибается;
3) все остальные объекты x_i^j, где $j = 1, \ldots, h$, $i = 1, \ldots, \min(D_j, D_0)$, причём $I(a_{\boldsymbol{d}}, x_i^j) = [d_j \geqslant i]$.

Монотонная сетка — это модель семейства алгоритмов с h непрерывными параметрами, в которой по мере увеличения j-го параметра ошибки возникают последовательно на объектах $x_1^j, \ldots, x_{D_j}^j$.

Пример 1. Монотонная двумерная сетка для выборки из $L = 5$ объектов, с $m = 0$ и $\boldsymbol{D} = (2, 3)$:

	a_{00}	a_{10}	a_{20}	a_{01}	a_{11}	a_{21}	a_{02}	a_{12}	a_{22}	a_{03}	a_{13}	a_{23}
x_1^1	0	**1**	1	0	**1**	1	0	**1**	1	0	**1**	1
x_2^1	0	0	**1**	0	0	**1**	0	0	**1**	0	0	**1**
x_1^2	0	0	0	**1**	**1**	**1**	1	1	1	1	1	1
x_2^2	0	0	0	0	0	0	**1**	**1**	**1**	1	1	1
x_3^2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	**1**	**1**	**1**

Теорема 2 (О монотонной h-мерной сетке). *Пусть A — h-мерная монотонная сетка, метод μ является ПМЭР, выполнено условие $|\boldsymbol{D}| \leqslant L - m$. Тогда вероятность переобучения $Q_\varepsilon = \sum\limits_{t=0}^{t_{\max}} Q_{\varepsilon,t}$, где $t_{\max} = \min(k, D)$ и $Q_{\varepsilon,t}$ — вклад t-слоя.*

В случае $t < t_{\max}$

$$Q_{\varepsilon,t} = \sum_{j=0}^h \alpha(\boldsymbol{D}, t, j) \frac{C_{L-t-j}^{\ell-j}}{C_L^\ell} H_{L-t-j}^{\ell-j,m}(s_t(\varepsilon)),$$

в случае $t = t_{\max}$

$$Q_{\varepsilon,t} = 1 - \sum_{i=0}^t \sum_{j=0}^h \alpha(\boldsymbol{D}, i, j) \frac{C_{L-i-j}^{\ell-j}}{C_L^\ell} H_{L-i-j}^{\ell-j,m}(s_t(\varepsilon)),$$

где числовые параметры α вычисляются через

$$\alpha(\boldsymbol{D}, t, j) = \sum_{|\boldsymbol{d}|=t} \sum_{\substack{I|=j \\ I\subseteq E}} \Big(\prod_{q\in I} [d_q < D_q]\Big)\Big(\prod_{r\in\bar{I}} [d_r = D_r]\Big),$$

где $E = \{1, \ldots, h\}$ и $\bar{I} = E \setminus I$.

Связка монотонных цепочек

Определение 2. *Множество алгоритмов* $A = \{a_d^b\colon b = 1,\ldots,h,\ d = 0,\ldots,D_b\}$, *называется связкой* h *монотонных цепочек алгоритмов высоты* $\boldsymbol{D} = (D_1,\ldots,D_h)$, *если*

1) *существует алгоритм* $a^* \in A$, *называемый лучшим в связке, такой, что* $a^* = a_0^b$ *для всех* b;
2) $n(a_d^b, \mathbb{X}) = m + d$ *при некотором* $m \geqslant 0$, *любом* $b \in \{1,\ldots,h\}$ *и любом* $d \leqslant D_b$;
3) *подмножество* $A_b = \{a_d^b : d = 0,\ldots,D_b\}$ *является монотонной цепочкой для всех* $b \in \{1,\ldots,h\}$;
4) *если для некоторого объекта* x_i *выполняется* $I(a_d^b, x_i) = I(a_{d'}^{b'}, x_i) = 1,\ b \neq b'$, *то* $I(a^*, x_i) = 1$.

Из определения следует, что все объекты $x \in \mathbb{X}$ можно отнести к одной из трёх категорий:

1) *шумовые объекты*, на которых любой алгоритм из A ошибается; их ровно m;
2) *безошибочные объекты*, на которых ни один из алгоритмов из A не ошибается;
3) все остальные объекты x_i^j, где $j = 1,\ldots,h$, $i = 1,\ldots,D_j$, причём $I(a_d^b, x_i^j) = [d \geqslant i][j = b]$.

Пример 2. Связка из трёх цепочек с $L = 8$, $m = 1$ и $\boldsymbol{D} = (1,2,3)$:

	a^*	a_1^1	a_1^2	a_2^2	a_1^3	a_2^3	a_3^3
x_1^0	1	1	1	1	1	1	1
x_2^0	0	0	0	0	0	0	0
x_1^1	0	**1**	0	0	0	0	0
x_1^2	0	0	**1**	1	0	0	0
x_2^2	0	0	0	**1**	0	0	0
x_1^2	0	0	0	0	**1**	1	1
x_2^3	0	0	0	0	0	**1**	1
x_3^3	0	0	0	0	0	0	**1**

Теорема 3 (О связке h цепочек). *Пусть* A — *связка из* h *цепочек, метод* μ *является ПМЭР и выполнены условия* $|\boldsymbol{D}| + m \leqslant L,\ D_i \leqslant k,\ i \in 1,\ldots,h$. *Тогда вероятность переобучения есть* $Q_\varepsilon = \sum\limits_{t=0}^{k} Q_{\varepsilon,t}$, *где* $Q_{\varepsilon,t}$ — *вклад* t*-слоя, который равен*

$$Q_{\varepsilon,t} = \sum_{i=1}^{h} \sum_{|I|=i} \omega_2 \sum_{\theta=0}^{(t-1)|\bar{I}|} \sum_{r=0}^{|\bar{I}|} \alpha(t,\theta,r,\boldsymbol{D},\bar{I}) \times \times \frac{C_{\ell-r-\omega_1}^{L-r-\omega_1-\theta-t|I|}}{C_L^\ell} H_{\ell-r-\omega_1,m}^{L-r-\omega_1-\theta-t|I|}(s_t(\varepsilon)),$$

где $I \subseteq E,\ \bar{I} = E\backslash I,\ \omega_1 = \sum\limits_{p\in I}[t < D_p],\ \omega_2 = \prod\limits_{p\in I}[t \leqslant D_p]$;

$$\alpha(t,\theta,r,\boldsymbol{D},\bar{I}) = \sum_{|\boldsymbol{d}|=\theta} \sum_{|J|=r} \Big(\prod_{p=1}^{|J|}[d_p < D_{J_p}][d_p < t]\Big) \times \times \Big(\prod_{q=1}^{|\bar{J}|}[d_q = D_{\bar{J}_q}][d_q < t]\Big),$$

где $J \subseteq \bar{I}$, $\bar{J} = \bar{I}/J$, J_p *и* $\bar{J}_q$ — p*-ый и* q*-ый элемент подмножеств* J *и* $\bar{J}$ *соответственно, а* $\boldsymbol{d}$ — *неотрицательный вектор индексов размерности* $|\bar{I}|$.

Унимодальная сетка

Аналогично неотрицательному вектору индексов $\boldsymbol{d}$, введём вектор индексов $\boldsymbol{w} = (w_i)_{i=1}^h$, с которого требование неотрицательности снято.

Определение 3. *Множество алгоритмов* $A = \{a_{\boldsymbol{w}}\colon -\boldsymbol{W}^- \leqslant \boldsymbol{w} \leqslant \boldsymbol{W}^+,\ |\boldsymbol{w}| \leqslant W_0\}$, *задаваемое двумя векторами высот* $-\boldsymbol{W}^- \leqslant \boldsymbol{0} \leqslant \boldsymbol{W}^+$ *и общей высотой* W_0, *называется унимодальной* h*-мерной сеткой алгоритмов, если выполнены условия:*

1. *если* $\boldsymbol{0} \leqslant \boldsymbol{w} < \boldsymbol{w}'$ *или* $\boldsymbol{w}' < \boldsymbol{w} \leqslant \boldsymbol{0}$, *то для всех* $x_i \in \mathbb{X}$ *выполнено* $I(a_{\boldsymbol{w}}, x_i) \leqslant I(a_{\boldsymbol{w}'}, x_i)$, *причём ровно* $|w - w'|$ *неравенств строгие.*
2. $n(a_{\boldsymbol{w}}, \mathbb{X}) = m + |\boldsymbol{w}|$ *при некотором* $m \geqslant 0$ *для всех* $a_{\boldsymbol{w}} \in A$. *Алгоритм* $a_{\boldsymbol{0}}$ *называется лучшим.*

Из определения следует, что все объекты $x \in \mathbb{X}$ можно отнести к одной из трёх категорий:

1) *шумовые объекты*, на которых любой алгоритм из A ошибается; их ровно m;
2) *безошибочные объекты*, на которых ни один из алгоритмов из A не ошибается;
3) все остальные объекты x_i^j, где $j = 1,\ldots,h$, $i = -W_j^-,\ldots,W_j^+$, и $I(a_{\boldsymbol{w}}, x_i^j) = [w_j \geqslant i > 0] + + [w_j \leqslant i < 0]$.

Унимодальная сетка — это модель семейства алгоритмов с h непрерывными параметрами, в которой по мере увеличения j-го параметра ошибки возникают последовательно на объектах $x_1^j,\ldots,x_{W_j^+}^j$, а при уменьшении — на $x_{-1}^j,\ldots,x_{-W_j^-}^j$.

Теорема 4 (Об унимодальной h-мерной сетке). *Пусть* A — h*-мерная унимодальная сетка, метод* μ *является ПМЭР и выполнены условия* $|\boldsymbol{W}^-| + |\boldsymbol{W}^+| \leqslant L - m$ *и* $W_0 \leqslant k$. *Тогда вероятность переобучения есть* $Q_\varepsilon = \sum\limits_{t=0}^{W_0} Q_{\varepsilon,t}$, *где* $Q_{\varepsilon,t}$ — *вклад* t*-слоя, который при* $t < W_0$ *равен*

$$Q_{\varepsilon,t} = \sum_{|\boldsymbol{d}|=t} \sum_{\theta=0}^{h} \sum_{\substack{I\subseteq E\\|I|=\theta}} \sum_{q=0}^{|I|} \sum_{\substack{J\subseteq I\\|J|=q}} \delta_1(\bar{J},\boldsymbol{d},\boldsymbol{W}^\pm) \times \times \sum_{p=0}^{q} \sum_{\substack{M\subseteq J\\|M|=p}} \delta_2(M,\bar{M},\boldsymbol{d},\boldsymbol{W}^\pm) \sum_{r=0}^{|\bar{I}|} \delta_3(r,\bar{I},\boldsymbol{d},\boldsymbol{W}^\pm) \times \times \frac{C_{L-q-p-r-t-\eta(\boldsymbol{d},I)}^{\ell-q-p-r}}{C_L^\ell} H_{L-q-p-r-t-\eta(\boldsymbol{d},I)}^{\ell-q-p-r,m}(s_t(\varepsilon)),$$

где $E = \{1,\ldots,h\},\ \bar{I} = E\backslash I,\ \bar{J} = I\backslash J,\ \bar{M} = J\backslash M$, $\eta(\boldsymbol{d},I) = \sum\limits_{i\in I} d_i$, *и целочисленные коэффициенты* δ

вычисляются следующим образом:

$$\delta_1(\bar{J}, \boldsymbol{d}, \boldsymbol{W}^{\pm}) = \prod_{i\in\bar{J}}\Big([d_i = W_i^+][d_i = W_i^-] - [d_i > 0][d_i = W_i^+][d_i \leqslant W_i^-] - [d_i > 0][d_i \leqslant W_i^+][d_i = W_i^+]\Big);$$

$$\delta_2(M, \bar{M}, \boldsymbol{d}, \boldsymbol{D}^{\pm}) = \prod_{j\in M}[d_j < W_j^+][d_j < W_j^-] \times \prod_{i\in\bar{M}}\Big([d_i = W_i^+][d_i < W_i^-] + [d_i < W_i^+][d_i = W_i^-] - [d_i > 0][d_i < W_i^+][d_i \leqslant W_i^-] - [d_i > 0][d_i \leqslant W_i^+][d_i < W_i^-]\Big);$$

$$\delta_3(r, \bar{I}, \boldsymbol{d}, \boldsymbol{D}^{\pm}) = \sum_{\substack{T\subseteq\bar{I}\\|T|=r}}\prod_{i\in T}[d_i > 0]\Big([d_i < W_i^+] + [d_i < W_i^-]\Big) \times \prod_{j\in\bar{I}\setminus T}[d_j > 0]\Big([d_j = W_j^+] + [d_j = W_j^-]\Big).$$

Эксперимент

В силу ограничения объёма статьи приведём результаты лишь одного эксперимента. Построим монотонную сетку размерности h с общей высотой D_0 и вектором высот $\boldsymbol{D} = (D_0, \ldots, D_0, D_*)$. Будем варьировать высоту последней размерности D_* от 0 до D_0. Графики зависимости вероятности переобучения Q_ε от D_* при различных h показаны на рис. 1.

Судя по графикам, основной рост Q_ε происходит при $D_* \leqslant 6$, а далее вероятность переобучения практически не меняется. Это согласуется с выводами предыдущих работ о том, что вероятность переобучения определяется нижними слоями семейства. Отсюда также следует и качественно новый вывод: добавление даже «не слишком богатой» размерности (высоты порядка 6) может приводить к значительному росту вероятности переобучения.

Выводы

Для трёх модельных многомерных семейств алгоритмов — монотонной сетки, связки монотонных цепочек и унимодальной сетки, получены точные оценки вероятности переобучения для случая, когда размерности имеют различную высоту. Если все высоты одинаковы, эти оценки совпадают с полученными ранее в [1].

Высоту размерности можно интерпретировать как «меру сложности» данной размерности. Она показывает, сколько алгоритмов, различимых на генеральной совокупности, можно получить, варьируя вектор параметров семейства вдоль данной

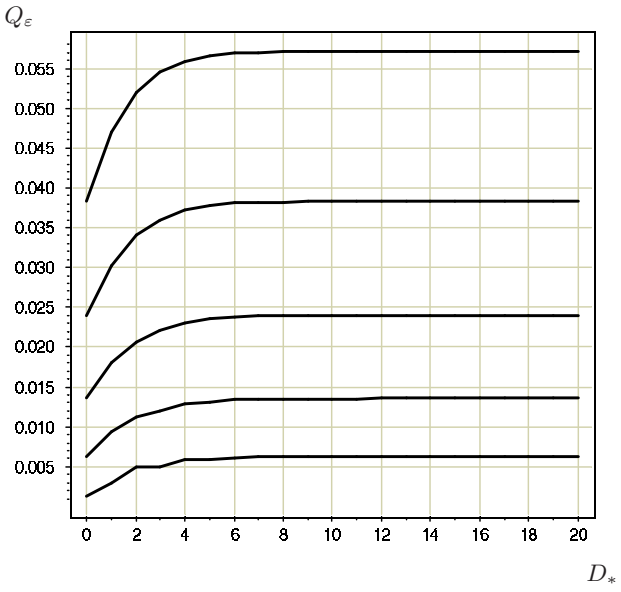


Рис. 1. Зависимость вероятности переобучения Q_ε монотонных сеток с общей высотой D_0 и вектором высот $\boldsymbol{D} = (D_0, \ldots, D_0, D_*)$ от параметра D_* при изменении h от 1 (нижний график) до 5 (верхний график), при $L = 500$, $\ell = 300$, $m = D_0 = 20$, $\varepsilon = 0{,}05$.

размерности. Другая интерпретация — сколько допустимых значений может принимать данная размерность.

Вычисления показали, что с ростом высоты одной из размерностей вероятность переобучения быстро возрастает и затем стабилизируется. Это означает, что «сложности» отдельных размерностей не так важны для определения вероятности переобучения, как их количество h.

Литература

[1] *Ботов П. В.* Точные оценки вероятности переобучения для монотонных и унимодальных семейств алгоритмов // Всеросс. конф. ММРО-14. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 7–10.

[2] *Толстихин И. О.* Вероятность переобучения плотных и разреженных семейств алгоритмов // Межд. конф. Интеллектуализация обработки информации ИОИ-8, 2010. — С. 83–86 (в данном сборнике).

[3] *Frey A. I.* Accurate estimates of the generalization ability for symmetric sets of predictors and randomized learning algorithms // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 241–250.

[4] *Vorontsov K. V.* Splitting and similarity phenomena in the sets of classifiers and their effect on the probability of overfitting // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 3. — Pp. 412–420.

[5] *Vorontsov K. V.* Exact combinatorial bounds on the probability of overfitting for empirical risk minimization // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 269–285.

Точные комбинаторные оценки обобщающей способности онлайнового обучения*

Воронцов К. В.[1]***, Решетняк И. М.***[2]
vokov@forecsys.ru[1], ilya.reshetnyak@gmail.com[2]
Москва, [1]ВЦ РАН, [2]ВМК МГУ

Рассматриваются задачи онлайнового обучения, когда обучающие объекты поступают последовательно, и в каждый момент времени выбирается лучший предиктор по критерию минимума числа ошибок на предыстории. Для нескольких модельных семейств предикторов получены точные формулы, выражающие зависимость вероятности ошибки от времени. Показано, что обучение гораздо эффективнее в тех случаях, когда семейство предикторов обладает свойствами расслоения и связности.

Exact combinatorial generalization bounds for online learning*

Vorontsov K. V.[1]***, Reshetnyak I. M.***[2]
Moscow, [1]Computing Center RAS, [2]Moscow State University

The online learning framework is considered, in which training objects come subsequently, and the better predictor is chosen at each moment from the empirical risk minimization. Exact combinatorial formulae are obtained that describe the probability of error as a function of time for several artificial sets of predictors. The learning is shown to be much more effective when the set of predictors possesses the properties of splitting and similarity.

В теории статистического обучения существует много подходов к оцениванию обобщающей способности алгоритмов классификации [3]. Многие оценки, начиная с классических [2], служат обоснованием известного эмпирического факта, что выбор алгоритма по критерию минимума частоты ошибок на обучающей выборке может приводить к *переобучению*, т. е. к существенно более высокой частоте ошибок на контрольной выборке. Как правило, переобучение тем сильнее, чем сложнее семейство алгоритмов, т. е. чем больше в нём *различимых* алгоритмов (два алгоритма *неразличимы*, если они допускают ошибки на одних и тех же объектах обучающей и контрольной выборки). Эксперименты [6] и точные комбинаторные оценки [7] показали, что переобучение зависит не только от числа различных алгоритмов, но и от степени их различности. Одновременное наличие свойств расслоения и связности у семейства алгоритмов приводит к радикальному снижению переобучения.

Будем говорить, что алгоритмы, допускающие m ошибок на объединённой выборке, образуют m-й слой. *Эффект расслоения* связан с тем, что в нижних слоях, как правило, находится ничтожно малая доля алгоритмов, однако чем ниже слой, тем выше вероятность получить алгоритм из этого слоя в результате обучения. Это приводит к сокращению «эффективной сложности» семейства, так как фактически используется лишь небольшая его часть.

Эффект связности возникает в семействах алгоритмов, непрерывных по параметрам. В этом случае для каждого алгоритма в семействе найдётся некоторое число алгоритмов, различимых с ним только на одном каком-то объекте полной выборки. Будем называть такие алгоритмы связанными. Схожие (в частности, связанные) алгоритмы вносят меньший вклад в вероятность переобучения, чем несхожие.

Показано [6], что семейства, состоящие всего из нескольких десятков алгоритмов и не обладающие свойствами расслоения или связности, могут иметь столь высокую вероятность переобучения, что их применение окажется нецелесообразным. В то же время, расслоенные и связные семейства могут содержать миллиарды алгоритмов, обладая при этом незначительным переобучением. Таким образом, сочетание этих двух эффектов является критически важным.

Точные оценки вероятности переобучения получены к настоящему моменту для ряда модельных семейств алгоритмов [1, 7, 4]. Эти семейства обладают некоторой «искусственной» структурой, что и позволяет выводить для них точные оценки с помощью комбинаторных методов. Такие семейства вряд ли могут порождаться практическими задачами. С другой стороны, они обладают теми же ключевыми свойствами, что и реальные семейства — расслоением, связностью, размерностью. Показано [1], что вероятность переобучения нейронных сетей, решающих деревьев, байесовских классификаторов на реальных задачах классификации неплохо приближается вероятностью переобучения модельного семейства — многомерной сетки алгоритмов, при соответствующем подборе её размерности. Вообще, изучение модельных семейств представляется необходимым промежуточным этапом построения комбинаторной теории переобучения.

Работа поддержана РФФИ (проект №08-07-00422) и программой ОМН РАН «Алгебраические и комбинаторные методы математической кибернетики и информационные системы нового поколения».

В данной работе исследуются задачи динамического или *онлайнового* (on-line) обучения [8], в которых обучающие объекты поступают потоком, и при получении каждого нового объекта необходимо корректировать текущий алгоритм (алгоритмы в онлайновых задачах будем называть *предикторами*). Рассматривается частная постановка задачи онлайнового обучения, для которой основные конструкции комбинаторной теории переобучения [7] переносятся практически без изменений. Методом порождающих и запрещающих множеств выводится точное выражение для *кривой обучения* — зависимости вероятности ошибки на следующем объекте от времени. Аналогично [6] вводится модельное семейство с расслоением и связностью — *монотонная цепочка* предикторов, а также соответствующие ей семейства, не обладающие свойствами расслоения и/или связности. Оказывается, что в случае онлайнового обучения вероятность ошибки также существенно понижается при одновременном наличии свойств расслоения и связности.

Задача онлайнового обучения

Общая постановка задачи. Имеется конечная последовательность объектов $X^T = (x_1, \ldots, x_T)$ и множество допустимых предсказаний A. Природа множеств X^T и A не оговаривается. В каждый момент времени t *предсказывающий алгоритм* μ получает подпоследовательность $X^t = (x_1, \ldots, x_t)$ и выдаёт некоторый элемент множества A — предсказание $a_{t+1} = \mu(X^t)$ относительно момента времени $t{+}1$. После того, как становится известен объект x_{t+1}, вычисляется величина потерь, возникших вследствие неточности сделанного предсказания $\mathscr{L}(a_{t+1}, x_{t+1})$, где $\mathscr{L}\colon A \times X^T \to \mathbb{R}$ — заданная *функция потерь*. Задача заключается в том, чтобы найти *кривую обучения* — зависимость математического ожидания потери от времени

$$Q(t) = \mathsf{E}\mathscr{L}(a_{t+1}, x_{t+1}), \quad t = 1, \ldots, T-1.$$

Темп её убывания характеризует обучаемость (способность к обобщению эмпирических фактов) предсказывающего алгоритма μ.

Вероятностная модель данных. Математическое ожидание будем понимать в смысле слабой вероятностной аксиоматики [5, 6, 7], полагая, что множество объектов X^T не случайно, но случаен порядок их появления, причём все $T!$ перестановок могут реализоваться с равной вероятностью. Это аналог стандартного предположения о том, что объекты выбираются случайно и независимо из неизвестного, но фиксированного распределения на множестве всех допустимых объектов, вообще говоря, бесконечном. Мы пользуемся ослабленным вероятностным предположением, не требующим введения бесконечных множеств и σ-алгебр на бесконечных множествах. При данном предположении случайная величина ξ — это произвольная функция $\xi(X^T)$ последовательности X^T, а математическое ожидание определяется как среднее по всем перестановкам, $\mathsf{E}\xi = \frac{1}{T!}\sum_{\sigma \in S_T} \xi(\sigma X^T)$, где S_T — симметрическая группа, σX^T — последовательность, полученная в результате действия перестановки σ на исходной последовательности X^T.

Частная постановка задачи. Сделаем три дополнительных предположения.

1. Пусть $A = \{a\colon X \to R\}$ — множество функций от объекта, называемых *предикторами*.

2. Пусть функция потерь бинарна: $\mathscr{L}(a, x) = 1$, если предиктор $a \in A$ ошибается на объекте $x \in X^T$, и $\mathscr{L}(a, x) = 0$, если a не ошибается на x.

Обозначим через $n(a, X)$ число ошибок предиктора a на множестве объектов X, а через $\nu(a, X) = \frac{1}{|X|} n(a, X)$ — частоту ошибок a на X.

3. Пусть алгоритм μ выбирает предиктор с минимальным числом ошибок на предыстории:

$$a_{t+1} = \mu(X^t) = \arg\min_{a \in A} n(a, X^t).$$

Природа множества R не оговаривается. В частности, если R — конечное множество классов, то естественно полагать $\mathscr{L}(a, x) = \big[a(x) \neq y^*(x)\big]$, где $y^*(x)$ — правильная классификация объекта x. Если $R = \mathbb{R}$, то имеем регрессионную задачу, в которой можно полагать $\mathscr{L}(a, x) = \big[|a(x) - y^*(x)| > \delta\big]$, где δ — заданный порог ошибки.

Бинарный вектор $\bar{a} = \big(\mathscr{L}(a, x_t)\big)_{t=1}^T$ будем называть *вектором ошибок* предиктора a. Векторы ошибок $\bar{a}$ всех предикторов $a \in A$ образуют *матрицу ошибок* размера $T \times |A|$. Будем полагать, что все столбцы этой матрицы попарно различны.

Если каждые два соседних столбца отличаются только по одной строке (хэммингово расстояние между столбцами равно единице), то множество A будем называть *цепочкой* предикторов.

Заметим, что $\mu(X^t)$ не зависит от порядка объектов в подпоследовательности X^t.

Кривые обучения для некоторых модельных семейств предикторов

Лемма 1. *Если значение случайной величины* $\xi(X^T) \equiv \xi(x_1, \ldots, x_t, x_{t+1})$ *не зависит от объектов* $x_{t+2}, \ldots, x_T$ *и от порядка объектов* $x_1, \ldots, x_t$, *то*

$$\mathsf{E}\xi = \frac{1}{C_T^t (T-t)} \sum_{X^t \subseteq X} \sum_{x \in X \setminus X^t} \xi(X^t, x),$$

где X^t — *всевозможные неупорядоченные подмножества мощности* t *множества объектов* X.

Функция потерь $\mathscr{L}(\mu(X^t), x_{t+1})$ удовлетворяет условию Леммы 1, откуда вытекает

Лемма 2. *Кривая обучения $Q(t)$ совпадает с зависимостью функционала полного скользящего контроля от длины обучающей выборки t:*

$$Q(t) = \frac{1}{C_T^t} \sum_{X \sqcup \bar{X}} \nu(\mu(X), \bar{X}),$$

где $X \sqcup \bar{X} = X^T$ — всевозможные разбиения множества X^T на два неупорядоченных подмножества — обучающую выборку X длины t и контрольную выборку $\bar{X}$ длины $T-t$.

Семейства из одного и двух элементов для обычного (off-line) обучения рассмотрены в [6, 7]. Рассмотрим их в случае онлайнового обучения.

Теорема 3. *Для семейства $A = \{a\}$, состоящего из одного предиктора с известным $n(a, X^T) = m$, кривая обучения не зависит от времени: $Q(t) = \frac{m}{T}$.*

Теорема 4. *Пусть $A = \{a_0, a_1\}$ и в X^T имеется ровно m_0 объектов, на которых ошибается только a_0, ровно m_1 объектов, на которых ошибается только a_1 и ровно m_2 объектов, на которых ошибаются оба предиктора. Тогда*

$$Q(t) = \sum_{s_0=0}^{m_0} \sum_{s_1=0}^{m_1} \sum_{s_2=0}^{m_2} \frac{C_{m_0}^{s_0} C_{m_1}^{s_1} C_{m_2}^{s_2} C_{T-m_0-m_1-m_2}^{t-s_0-s_1-s_2}}{C_T^t (T-t)} \times$$
$$\times \big((m_0 - s_0)[s_0 < s_1] + (m_1 - s_1)[s_0 \geqslant s_1] + m_2 - s_2\big).$$

Исследование поведения кривой $Q(t)$ в зависимости от разности слоёв $|m_0 - m_1|$ и от хэммингова расстояния между предикторами $m_0 + m_1$ показывает, что эффекты расслоения и сходства проявляются даже в этом простейшем случае, когда предикторов только два, и способствуют уменьшению вероятности ошибки, рис. 1.

Метод порождающих и запрещающих множеств [7] также переносится на случай онлайнового обучения.

Гипотеза 1. При любом $t = 1, \ldots, T-1$ для каждого предиктора $a \in A$ можно указать подмножества $X_a, X'_a \subset X^T$ такие, что для всех t-элементных подмножеств $X \subset X^T$

$$\big[\mu(X){=}a\big] = \big[X_a \subseteq X\big]\big[X'_a \subseteq \bar{X}\big].$$

Множество X_a называется *порождающим*, X'_a — *запрещающим* для предиктора a.

Теорема 5. *Если справедлива Гипотеза 1, то*

$$Q(t) = \sum_{a \in A} \frac{P(a)}{T-t} \left(\frac{t_a}{T_a} n(a, X'_a) + \frac{T_a - t_a}{T_a} n(a, X^T) \right),$$

где $P(a) = \mathsf{E}\big[\mu(X){=}a\big] = C_{T_a}^{t_a} / C_T^t$ — вероятность получить предиктор a в результате обучения, $T_a = T - |X_a| - |X'_a|$, $t_a = t - |X_a|$.

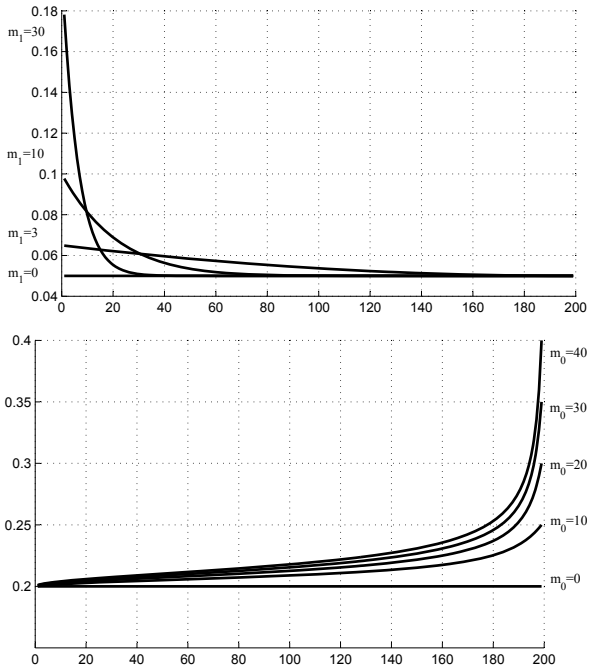


Рис. 1. Кривая обучения $Q(t)$ для пары предикторов, $T = 200$. Вверху: $m_0 = 0$, $m_1 = 0, 3, 10, 30$, $m_2 = 10$. Внизу: $m_0 = m_1 = 0, 10, 20, 30, 40$, $m_2 = 40 - m_0$.

Теорема 5 позволяет эффективно вычислять $Q(t)$ для некоторых модельных семейств предикторов, в частности, для монотонной цепочки.

Монотонная цепочка [7] — это множество предикторов $A = \{a_0, \ldots, a_D\}$, удовлетворяющее двум требованиям:

1) $n(a_d, X^T) = m + d$ для всех $d = 0, \ldots, D$;
2) $\mathscr{L}(a_{d-1}, x) \leqslant \mathscr{L}(a_d, x)$ для всех $d = 1, \ldots, D$ и всех $x \in X^T$.

Монотонная цепочка является идеализированной моделью связного семейства предикторов с одним параметром, предполагающая, что при непрерывном отклонении параметра в сторону от оптимального значения число ошибок предиктора на полной выборке монотонно не убывает.

Теорема 6. *Для монотонной цепочки $\{a_0, \ldots, a_D\}$*

$$Q(t) = \sum_{d=0}^{\min(D, T-t)} \frac{C_{T-d-1}^{t-1}}{C_T^t (T-t)} R_T^t(d, m),$$

$$R_T^t(d, m) = \begin{cases} d + m\big(\frac{T-d-t}{T-d-1}\big), & d < D; \\ d\big(\frac{T-d}{t}\big) + m\big(\frac{T-d-t}{t}\big), & d = D. \end{cases}$$

На рис. 2 показаны кривые $Q(t)$ для различных значений числа D предикторов в цепочке. Начиная с $t \sim 40$ вероятность ошибки практически полностью определяется несколькими лучшими предикторами, т. е. нижними слоями семейства. При этом вероятность ошибки не сильно отличается от $\frac{m}{T}$ — частоты ошибок лучшего предиктора.

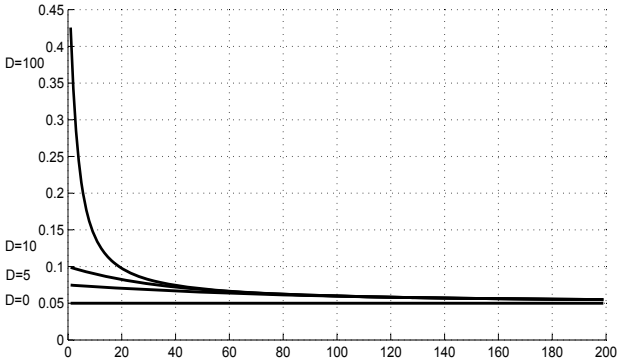


Рис. 2. Кривая обучения $Q(t)$ для монотонной цепочки предикторов, при $T = 200,\ m = 10,\ D = 0, 5, 10, 100.$

Вычислительный эксперимент

Для случая оффлайнового обучения в [6] описан эксперимент, целью которого было определить, какое из двух свойств — расслоение или связность — более важно для уменьшения переобучения. Идея эксперимента заключалась в том, чтобы сравнить четыре семейства: *цепочку с расслоением*, в которой лучший алгоритм допускает m ошибок; *цепочку без расслоения*, в которой все алгоритмы допускают m или $m+1$ ошибок; и ещё две *не-цепочки*, которые получаются из первых двух семейств путём случайной перестановки элементов в каждом столбце матрицы ошибок. Основной вывод [6] заключался в том, что важно наличие обоих свойств одновременно, а семейства, не обладающие хотя бы одним из двух свойств, могут сильно переобучаться уже при $|A|$ порядка нескольких десятков. Поскольку для не-цепочек удобных теоретических оценок пока не найдено, эксперимент проводился методом Монте-Карло по 10^4 случайных разбиений на обучающую и контрольную выборки.

В данной работе аналогичный эксперимент ставится для задачи онлайнового обучения. Матрицы ошибок четырёх семейств предикторов строятся точно так же. Методом Монте-Карло генерируется 10^4 случайных перестановок выборки. Основное отличие этого эксперимента в том, что вместо зависимости вероятности переобучения от $|A|$ строятся и сравниваются кривые обучения $Q(t)$, рис. 3.

Выводы

Принятая нами вероятностная модель данных основана на предположении, что порядок поступления объектов не зависит от времени. Именно это и позволило перенести основные конструкции комбинаторной теории переобучения [5–7] на задачи онлайнового обучения и получить в явном виде зависимости вероятности ошибки от времени. Показано, что, как и в обычных (оффлайновых) задачах обучения, эффекты расслоения и связности в семействах предикторов способствуют уменьшению вероятности ошибки.

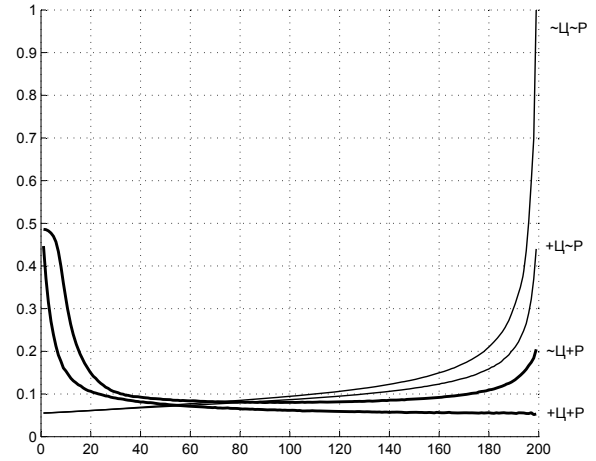


Рис. 3. Кривая обучения $Q(t)$ для четырёх семейств: цепочка с расслоением (+Ц+Р), не-цепочка с расслоением (~Ц+Р), цепочка без расслоения (+Ц~Р), не-цепочка без расслоения (~Ц~Р), при $T = 200,\ |A| = 200,\ m = 10.$

Заметим, что предложенная вероятностная модель неприменима в случае нестационарных процессов обучения, когда вероятность ошибки отдельных предикторов меняется во времени. В дальнейшем это ограничение модели предполагается снять путём введения ограничений на множество допустимых перестановок.

Литература

[1] *Ботов П. В.* Точные оценки вероятности переобучения для монотонных и унимодальных семейств алгоритмов // Всеросс. конф. ММРО-14. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 7–10.

[2] *Вапник В Н., Червоненкис А. Я.* Теория распознавания образов. — М.: Наука, 1974.

[3] *Boucheron S., Bousquet O., Lugosi G.* Theory of classification: A survey of some recent advances // ESAIM: Probability and Statistics. — 2005. — No. 9. — Pp. 323–375.

[4] *Frey A. I.* Accurate estimates of the generalization ability for symmetric sets of predictors and randomized learning algorithms // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 241–250.

[5] *Vorontsov K. V.* Combinatorial probability and the tightness of generalization bounds // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2008. — Vol. 18, No. 2. — Pp. 243–259.

[6] *Vorontsov K. V.* Splitting and similarity phenomena in the sets of classifiers and their effect on the probability of overfitting // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 3. — Pp. 412–420.

[7] *Vorontsov K. V.* Exact combinatorial bounds on the probability of overfitting for empirical risk minimization // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 269–285.

[8] *Vovk V., Gammerman A., Shafer G.* Algorithmic learning in a random world. — Springer Science+Business Media, Inc., 2005. — 324 p.

Информационная модель алгоритма классификации и оценка его надёжности*

Гуров С. И.
sgur@cs.msu.ru
Москва, факультет Вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М. В. Ломоносова

В работе предлагается новая информационная и определяемые ей статистические модели алгоритма классификации. На их основе получены отличные от традиционных оценки вероятности правильной классификации объекта.

Проблема оценки надёжности алгоритмов классификации — одна из основных в теории обучения по прецедентам, и ей посвящено большое количество работ (обзор по направлениям см. в [2]). При этом в основном потоке публикаций рассматривается постановка задачи в рамках либо известной теории Вапника-Червоненкиса (VC-теория), либо в том или ином развитии этой теории.

В данной работе представлены первые результаты в решении указанной проблемы, полученные с использованием новой информационной (в терминах формальной зависимости «вектор параметров – класс») модели алгоритма классификации, свободной от основных положений VC-теории.

Постановка задачи

Рассматривается конкретный алгоритм A детерминированной без отказов классификации на два класса объектов из некоторого пространства $\mathcal{X}$ — *классифицирующий алгоритм*. Считается, что создание (обучение) алгоритма A проводилось с использованием некоторого подмножества $\mathcal{X}$ — (конечной) *обучающей* последовательности.

Необходимо оценить вероятность P правильной классификации произвольного объекта из $\mathcal{X}$. Оценка осуществляется тестированием алгоритма A на *контрольной* выборке прецедентов из $\mathcal{X}$. При этом единственными данными для оценки P является информация о том, что на контрольной выборке длины n алгоритм A совершил m ошибок.

Заметим, что в данной постановке класс F алгоритмов, из которого, может быть, был выбран A, не фиксируется. Такая постановка обладает очевидными преимуществами перед другими, принимающими требование — обозначим его (C) — VC-теории и некоторых других подходов об априорном указании F, в результате чего становится необходимым решать непростые (подчас неразрешимые) вопросы, связанные с определением различных характеристик класса F (ёмкость, функция роста, коэффициент разнообразия и др.; о данных трудностях и путях их преодоления см., например, в [2, 4, 9]). Кроме того, предположение (C) часто не соответствует реальному процессу построения классифицирующих алгоритмов. Наконец, одна и та же дискриминантная функция на $\mathcal{X}$ может быть получена реализацией различных алгоритмов, принадлежащих разным классам, что приведёт, вообще говоря, к разным оценкам надёжности осуществляемой ей классификации.

Классический подход

В различных подходах к решению указанной задачи часто принимаются предположения (например, о типах распределений), в результате чего для оценки P требуются трудно вычислимые или даже ненаблюдаемые параметры [4].

Оценки различного типа для вероятности P в указанной выше постановке, полученные в рамках классических статистических моделей без привлечения дополнительных предположений, приведены в [5].

Во всех указанных здесь подходах используется

Гипотеза 1. На пространстве образов $\mathcal{X}$ задано (может быть неизвестное) распределение вероятностей $P(X)$, $X \subseteq \mathcal{X}$, и любой рассматриваемый набор образов $x_1, x_2, \ldots, x_n$ из $\mathcal{X}$ считается (если явно не указано иначе), реализацией независимой выборки n случайных величин из генеральной совокупности с распределением $P(X)$.

Впрочем, данная гипотеза также может быть сформулирована в рамках слабой вероятностной аксиоматики [3, 4].

Все упомянутые выше подходы опираются на классическую информационную модель, описывающую функционирование алгоритма классификации как процесс:

1) получения описания объекта $x \in \mathcal{X}$;
2) получения значения r случайной величины, равномерно распределённой на отрезке $[0, 1]$;
3) сравнения r с внутренним параметром $P \in [0, 1]$ алгоритма;
4) выдачи правильного ответа о принадлежности x, если $r \leqslant P$, и неправильного — в противном случае.

Можно считать, что описание x содержит скрытый двузначный параметр z, кодирующий принадлежность x тому или иному классу, и классификация осуществляется, опираясь на «подсмотрен-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №№ 10-01-00131-а, 08-01-00405-а и компании *Intel Corp.*

ное» алгоритмом значение z. Статистическая модель, соответствующая данной информационной — урновая схема Бернулли.

Представляется, однако, что в силу своей универсальности, схема Бернулли является слишком грубой формализацией процесса классификации, осуществляемой данным алгоритмом A. Она, например, не учитывает факт построения (настройки) A по обучающейся последовательности, в силу чего большие значения искомого параметра P более вероятны, чем малые, и более того, $P \geqslant \frac{1}{2}$.

Ниже развивается подход, опирающийся на предлагаемую новую, более адекватную информационную и определяемые ей соответствующие статистические модели алгоритмов классификации.

Напомним, что *информационная модель*, в отличие от математической, не предполагает описания поведения объекта с помощью уравнений, соотношений, закономерностей и т.д., моделирующих реальные физические процессы, а представляет его описание в терминах формальных логических зависимостей «вход-выход», обычно никак не связанных с указанными процессами, а обеспечивающим только, по возможности, максимально правильное нахождение реакции объекта на данную ситуацию («чёрный ящик» в кибернетике).

Информационная модель классифицирующего алгоритма

Предлагаемая информационная модель алгоритма классификации базируется на следующих предположениях:

(А) информация о значениях n и m является достаточной и адекватной для оценки вероятности P;

(Б) каждый классифицирующий алгоритм характеризуется значением некоторого скрытого неслучайного, но неизвестного параметра $t \in [0,1]$, определяющим его степень «необученности».

Условие (А) будет выполняться, например, когда экзаменационная выборка независима от обучающей, т. е. когда справедлива **Гипотеза 1**.

Понятно, что $m \leqslant \frac{n}{2}$, поскольку при $\frac{n}{2} < m \leqslant n$ можно вернуться к этапу построения алгоритма и соответствующим образом изменить решающее правило. Будем далее считать, что $1 \leqslant m$, т. к. случай 0-события ($m = 0$) требует специального рассмотрения, который предполагается изучить при дальнейших исследованиях. Таким образом, в настоящей работе считаем, что $1 \leqslant m \leqslant \frac{n}{2},\ 2 \leqslant n$.

Условие (Б) описывает предлагаемую информационную модель функционирования алгоритма классификации как процесс из 4 либо 5 шагов. Первые два из них совпадают с соответствующими описанными для классической модели в предыдущем разделе. Далее осуществляются шаги 3–5:

3) сравнение r с внутренним параметром $t \in [0,1]$ алгоритма;
4) в случае $t \leqslant r$ — выдача правильного ответа о принадлежности x;
5) в противном случае — выдача правильного ответа с вероятностью p (алгоритм с данной вероятностью «угадывает» принадлежность объекта классу).

Можно, как и ранее, считать, что описание x содержит скрытый параметр z, и алгоритм на шаге 4) — всегда, а на шаге 5) — с вероятностью p выдаёт «подсмотренное» значение z; иначе выдаётся значение, ему противоположное. Статистическая модель, соответствующая данной информационной, может быть описана как двухуровневое испытание по урновой схеме Бернулли.

Естественно считать $\frac{1}{2} \leqslant p$. Ясно, что при этом значение $1-t$ характеризует долю правильной классификации.

В данных предположениях вероятность P правильной классификации произвольного объекта оценивается как

$$P = 1 - t + tp \geqslant 1 - \frac{t}{2}, \quad \frac{m}{n} \leqslant t \leqslant 1. \qquad (1)$$

Теперь наша задача — оценить значение t. Это можно сделать, построив на основе приведённой информационной модели алгоритма две его статистические модели: дискретную и непрерывную[1].

При этом крайние значения t означают, что:

$t = 0$ — удалось построить «абсолютный» алгоритм, правильно осуществляющий классификацию любого предъявляемого объекта;

$t = 1$ — построенный алгоритм выдаёт случайный ответ о принадлежности x (для чего не требуется даже обращения к описанию x), и при этом ясно, что значение вероятности p правильного ответа вследствие обучения алгоритма A будет не менее $\frac{1}{2}$ (этот минимум реализуется при условии равновероятного появления объектов из классов).

В рамках предлагаемой модели мы описываем реальный алгоритм некоторым значением t, лежащим между этими крайними идеальными случаями.

Дискретная модель (ДМ). Считаем, что $[(1-t)n]$ элементов контрольной выборки алгоритм отклассифицировал правильно, «подсмотрев» значение параметра z, а классификация остальных прецедентов — результат случайного угадывания с вероятностью успеха p.

Непрерывная модель (НМ). Считаем, что классификация каждого прецедента происходит

[1] Данные модели соответствуют осреднению «по времени» и «по совокупности» соответственно в рамках эргодической теории случайных процессов.

следующим образом: если значение r, полученное в результате разыгрывания равномерной распределённой на интервале $[0,1]$ случайной величины, оказалось не менее t, то алгоритм выдаёт «подсмотренное» значение параметра z, а в противном случае происходит случайное угадывание принадлежности объекта классу с вероятностью успеха p.

Общепринятыми являются следующие возможности определить параметр t: (1) из условия максимума правдоподобия и (2) по апостериорному распределению (максимум апостериорной вероятности, математическое ожидание, медиана, интервальные оценки) в рамках частотного и бейесовского подхода соответственно. Очевидно также, что при равномерном априорном, апостериорное распределение есть нормированная функция правдоподобия.

Оценки в рамках ДМ

Полагаем $t = \frac{k}{n}$, $m \leqslant k \leqslant n$. Функция правдоподобия $L(k)$ параметра t, пересчитанная для k, будет иметь вид

$$L(k;\, n, m) = C_k^m p^{n-m}(1-p)^{m-n+k} = \frac{C_k^m}{2^k}. \qquad (2)$$

Легко показать, что максимум $L(k;\, n, m)$ будет наблюдаться для $k \in \{2m-1, 2m\}$, откуда верхняя оценка параметра t есть $\frac{2m}{n}$, а оценка $\widehat{P}_{ML}$ максимума правдоподобия P по (1) —

$$\widehat{P}_{ML} \geqslant 1 - \frac{m}{n} = \widehat{P}_{Cl}\,. \qquad (3)$$

Отличие от классической оценки тут состоит в знаке: в (3) стоит $\geqslant$, а не $=$, показывая, что классическая точечная оценка $\widehat{P}_{Cl}$ для P занижена. Объяснение этому факту — неучёт в классической модели, при справедливости **Гипотезы 1**, результатов работы алгоритма на обучающей выборке, где частота ошибки, скорее всего, меньше $\frac{m}{n}$.

Достоверность η оценки (3) может быть определена в рамках бейесовского подхода для равномерного априорного распределения значения k:

$$\eta = \eta(K; n, m) = \frac{\sum_{k=m}^{K} \frac{C_k^m}{2^k}}{\sum_{k=m}^{n} \frac{C_k^m}{2^k}}\,. \qquad (4)$$

По формуле (4) можно по некоторым значениям η определить достоверность оценки $P = 1 - \frac{K}{n}$, а при $K = 2m$ — для (3). Например, $\eta(2; n, 1) = \frac{1}{2-(n+2)/2^n}$, и при $m = 1$ классическая оценка P для не слишком малых n является медианной (при этом для $n = 2, 3$ — сильно заниженной[2]). Так, для $n = 10$ и $m = 1$ по (3) имеем $0{,}9 \leqslant P$, в то время как классическая медианная оценка даёт $P = 0{,}85$ [1].

Приведём теперь оценки P высокой (практически) одинаковой достоверности при тех же значениях $n = 10$ и $m = 1$ по предлагаемой и классической моделям. По (4) имеем $\eta(6; 10, 1) = 0{,}943 \approx$ $\approx 0{,}95$, откуда $t = 0{,}6$ и по (1) — $0{,}7 \leqslant P$, а при классическом доверительном с $\eta = 0{,}95$ оценивании получим $0{,}61 \leqslant P \leqslant 0{,}99$ [8]. Далее, поскольку $\eta(5; 10, 1) = 0{,}895 \approx 0{,}9$, по (4) имеем $t = 0{,}5$ и по (1) — $0{,}75 \leqslant P$, в то время, как классическое доверительное с $\eta = 0{,}9$ оценивание даёт $0{,}66 \leqslant P \leqslant 0{,}99$.

Несложный анализ показывает, что классические оценки тем более занижены, чем $\frac{m}{n}$ ближе к $\frac{1}{2}$.

Понятно, что приведённые значения P — демонстрационные, возможно, далёкие от тех, которые реально могут появиться на практике. Заметим, что возможно вычисление сумм в (4) через значения неполной бетта-функции [1].

Оценки в рамках НМ

В этом случае функция правдоподобия $L(t)$ есть

$$L(t;\, n, m) = C_n^m \Big(1 - \frac{t}{2}\Big)^{n-m} \Big(\frac{t}{2}\Big)^m, \quad \frac{m}{n} \leqslant t \leqslant 1\,,$$

максимум которой достигается при $t = \frac{2m}{n}$. Совпадение оценок со случаем ДМ говорит об «эргодичности» рассматриваемой информационной модели, поэтому ДМ есть просто дискретный аналог НМ, и выбор какой-либо из них определяется лишь удобством их использования в конкретной задаче.

Интервальные оценки для P в рамках бейесовского подхода с равномерным априорном распределением могут быть получены по апостериорному распределению с плотностью

$$f_{\text{a\_post}}(t;\, n, m) = \frac{\big(1 - \frac{t}{2}\big)^{n-m} \big(\frac{t}{2}\big)^m}{M(n,\, m)}, \qquad (5)$$
$$\frac{m}{n} \leqslant t \leqslant 1\,,$$

где $M(n,\, m) = \int_{\frac{m}{n}}^{1} \big(1 - \frac{t}{2}\big)^{n-m} \big(\frac{t}{2}\big)^m dt$ — нормирующий множитель.

На рис. 1 изображён график функции $f(t) = (1 - \frac{t}{2})^9 \frac{t}{2} \propto f_{\text{a\_post}}(t;\, 10, 1)$.

По (5) возможно получение оценок P для произвольных значений η. Простой анализ показывает, что такие оценки точнее классических. В частности, для $n = 10$ и $m = 1$ интервальная оценка по $f_{\text{a\_post}}$ практически совпадает для полученной в ДМ.

Выводы

Предложенная информационная модель более адекватно описывает работу классифицирующего алгоритма, чем классическая урновая схема.

[2] Автор не считает возможным делать статистические выводы для таких значений n [7].

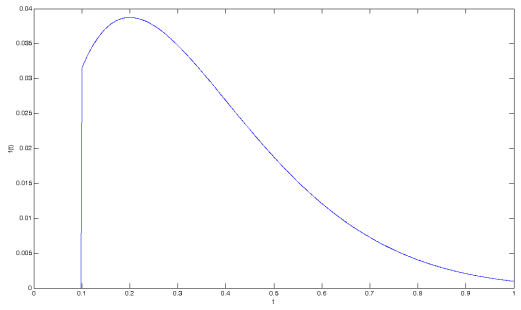


Рис. 1. График функции $f(t) = \left(1 - \frac{t}{2}\right)^9 \frac{t}{2}$.

Модель не использует являющееся слабым местом VC-теории предположение (C) об априорном задании класса, из которого выбирается алгоритм. На основе введённой модели возможно получение более точных, чем классические, оценок надёжности классификации. Дальнейшее уточнение оценок возможно путём отказа от предположения о равномерности априорного распределения с использованием принципа согласованности [6].

Интересным направлением дальнейших исследований является сравнение новых оценок с известными, получаемыми на основе различных подходов, не использующих предположение (C). Возможна и адаптация указанных подходов к введённой модели.

Также на основе метода, изложенного в [7], может быть проведено расширение введённой модели на случай $m = 0$, т. е. когда неправильная классификация является 0-событием.

Литература

[1] *Большев Л. Н., Смирнов Н. В.* Таблицы математической статистики. — М.: Наука, 1965. — 464 с.

[2] *Воронцов К. В.* Обзор современных исследований по проблеме качества обучения алгоритмов // Таврический вестник информатики и математики. — 2004. — № 1. — С. 5–24.

[3] *Vorontsov, K. V.* Combinatorial probability and the tightness of generalization bounds // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2008. — Vol. 18, No. 2. — С. 243-–259.

[4] *Воронцов К. В.* Комбинаторная теория надёжности обучения по прецедентам: Дис. док. физ.-мат. наук: 05-13-17. — Вычислительный центр РАН, 2010. — 271 с. `http://www.machinelearning.ru/wiki/images/b/b6/Voron10doct.pdf`.

[5] *Гуров С. И.* Оценка надёжности классифицирующих алгоритмов. — М.: Издательский отдел ф-та ВМиК МГУ, 2002. — 45 с.

[6] *Гуров С. И.* Интервальное оценивание на основе принципа согласованности // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Прикладная математика». — 2008. — Вып. 9, № 14 (74). — С. 77–93.

[7] *Гуров С. И.* Оценка вероятности 0-события // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Прикладная математика», — 2009. — Вып. 3, № 28 (14). — С. 55–66.

[8] *Закс Л.* Статистическое оценивание. — М.: Статистика, 1976. — 598 с.

[9] *Лбов Г. С., Старева Н. Г.* Логические решающие функции и вопросы статистической устойчивости решений. — Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 1999. — 212 с.

—

Применение pVCD метода оценивания емкости классов алгоритмов эмпирического обобщения

Донской В. И.
vidonskoy@mail.ru
Симферополь, Таврический национальный университет им. В. И. Вернадского

В докладе представлен подход к оцениванию емкости классов решающих правил, используемых в задачах машинного обучения и поиска закономерностей, называемый pVCD методом. Рассматриваются результаты использования pVCD метода для ряда применяемых на практике семейств моделей эмпирического обобщения.

The pVCD method application for VC-dimension estimation

Donskoy V. I.
Tavrida National V. I. Vernadsky University, Simferopol, Ukraine

The method called pVCD is presented. This method enables to obtain estimations of VC-Dimension for classes of algorithms of empirical generalization. The results of application of the pVCD method for some classes of algorithms which are in common practice are offered.

Введение

Рассматриваемый в докладе pVCD метод предполагает сужение семейства моделей эмпирического обобщения до классов, реализуемых на компьютерах, и шире — рассматривая их частично-рекурсивные представления.

Обозначим S — произвольное семейство частично-рекурсивных функций (алгоритмов), состоящее из функций вида $A\colon X^n \to \{0,1\}$,

$$X^n = \big\{X = (x_1, \dots x_n)\colon x_i \in \{0, \dots, 2^M - 1\}\big\}.$$

Выборка, состоящая из l произвольных элементов множества X^n, обозначается $\widetilde{X}_l = X_1, \dots, X_l$ и представляет собой упорядоченный набор $n \times l$ ограниченных чисел из расширенного натурального ряда. Теоретически и практически допустимо считать все рассматриваемые числа представленными в виде бинарных строк. Множество всех выборок обозначается X^l. Множество $\{0,1\}^*$ всех строк из нулей и единиц любой длины обычным образом представляет числа $0, 1, 2, \dots$ Длина слова $p \in \{0,1\}^*$ обозначается $\mathrm{len}(p)$. Класс частично-рекурсивных функций обозначается $P_{\text{p.r.}}$.

Определение 1. *Пусть U — такая частично-рекурсивная функция, что для каждого алгоритма $A \in S$ и для любой выборки $\widetilde{X}_l$ найдется двоичное слово p, которое обеспечивает выполнение равенства $U(p, \widetilde{X}_l) = \widetilde{y}$, где $\widetilde{y} = A(X_1), \dots, A(X_l)$ — двоичное слово (строка) длины l. При этом каждый алгоритм $A \in S$ полагается определенным на каждой выборке $\widetilde{X}_l$ из X^l. Функция U с указанными свойствами существует в силу существования универсальной функции двух аргументов для любого семейства частично-рекурсивных функций одного аргумента.*

1° *Сложность алгоритма A относительно выборки $\widetilde{X}_l$ по частично-рекурсивной функции U есть*

$$K_U(A \mid \widetilde{X}_l) = \min\big\{\mathrm{len}(p)\colon U(p, \widetilde{X}_l) = \widetilde{y}\big\}.$$

2° *Сложность алгоритма A на множестве X^l по частично-рекурсивной функции U есть*

$$K_{U,X^l}(A) = \max_{\widetilde{X}_l \in X^l} K_U(A \mid \widetilde{X}_l)$$

3° *Сложность семейства алгоритмов S на множестве X^l по частично-рекурсивной функции U есть*

$$K_{U,X^l}(S) = \max_{A \in S} K_{U,X^l}(A).$$

4° *Сложность семейства алгоритмов S на множестве X^l есть*

$$K_l(S) = \min_{U \in P_{\text{p.r.}}} K_{U,X^l}(S).$$

В приведенном определении сложность семейства алгоритмов S на множестве всех возможных выборок X^l длины l — это наименьшая длина двоичного слова p, по которому можно восстановить самый сложный (и любой) алгоритм $A \in S$. Важно, что слово p обрабатывается одной и той же функцией (программой) U^*, причем, согласно 4°, наилучшей в следующем смысле. Программа U^* обеспечивает наибольшее сжатие информации о семействе S в слово p длины $K_l(S)$. Мажоранту сложности $K_l(S)$ можно получить, если точно указать структуру слова p, подлежащего расшифровке, и его длину в битах, а также представить алгоритм обработки этого слова, который будет использоваться вместо программы U^* для оценивания сложности сверху.

Теорема 1 ([6]). *Пусть система частично-рекурсивных функций S вида $A\colon X^n \to \{0,1\}$ имеет ограниченную емкость h_S и колмогоровскую*

сложность $K_l(S)$. Тогда при конечных значениях $h_S \geqslant 2$ и $l > h_S$ имеет место двойное неравенство $h_S \leqslant K_l(S) < h_S \log l$.

Свойства сложности $K_l(S)$.

1. Колмогоровская сложность семейства алгоритмов равна наименьшему целому, большему или равному логарифму функции роста этого семейства: $K_l(S) = \lceil \log m^S(l) \rceil$;
2. $0 \leqslant K_l(S) \leqslant l$;
3. Если $K_l(S) = o(l)$ при $l \to \infty$, то имеет место равномерная сходимость эмпирических частот к их вероятностям по всему классу S;
4. Для любого алгоритма $U \in P_{\text{p.r.}}$ выполняется неравенство $K_l(S) \leqslant K_{U,X^l}(S)$.

Будем обозначать $h_S = \text{VCD}(S)$ емкость класса S. Подход к оцениванию VCD на основе неравенства

$$\text{VCD}(S) \leqslant \text{len}(p) \colon U(p, \widetilde{X}_l) = \widetilde{y} = \big(A(X_1), \ldots, A(X_l)\big)$$

называется методом программирования оценки VCD, сокращенно — pVCD [2]. Метод pVCD предполагает конструирование сжатого описания (слова) одной и той же структуры для любого $A \in S$ и указания алгоритма U, обрабатывающего вход $(p, \widetilde{X}_l)$. Длина такого слова p обозначается $\text{pVCD}(S) = \text{len}(p)$. Оценка $\text{pVCD}(S)$ может быть получена не единственным способом и ее качество определяется найденным алгоритмом сжатия U.

Лемма 2. *(Об аддитивности pVCD оценки композиции алгоритмов). Пусть*

$$S_0^r = \{f = f_1 \circ \cdots \circ f_r \colon f_1 \in S_1, \ldots, f_r \in S_r\}$$

— класс композиций алгоритмов зафиксированной структуры $f(f_1, \ldots, f_r)$, принадлежащих семействам $S_1, \ldots, S_r$, для которых известны оценки $\text{pVCD}(S_1) = L_1, \ldots, \text{pVCD}(S_r) = L_r$. Тогда справедлива оценка $\text{pVCD}(S_0^r) = \sum\limits_{j=1}^{r} L_j$.

Оценивание VCD нейронной сети с единственным скрытым слоем, содержащим k элементов (класс $\text{NN}_{k,1}$)

В работе [4] для нейронной сети с единственным скрытым слоем, содержащим k элементов, и зафиксированной непараметрической активационной функцией σ представлена оценка

$$\text{VCD}(\text{NN}_{k,1}) = (2kn + 4k + 2) \times \log\big(e(kn + 2k + 1)\big).$$

Используя pVCD метод, легко получить оценку

$$\text{pVCD}(\text{NN}_{k,1}) = M(nk + 2k + 1),$$

где M — число бит памяти, выделяемых для записи одного параметра; n — размерность входа.

Для класса $N_{k,m}$ нейронных сетей с k элементами в каждом из m скрытых слоев получена оценка

$$\text{pVCD}(N_{k,m}) = M(nk + 2mk^2).$$

VCD суперпозиции $f(F_1, \ldots, F_k)$ с фиксированным логическим корректором $f \in P_2(k)$

Пусть $F_1, \ldots, F_k$ — семейства алгоритмов вида $A \colon X^n \to \{0, 1\}$ емкостью $\text{VCD}(F_1), \ldots, \text{VCD}(F_k)$, и f — фиксированная булева функция. Обозначим

$$f(F_1, \ldots, F_k) = \{f(f_1, \ldots, f_k) \colon f_i \in F_i,\ i = 1, \ldots, k\}.$$

В работе [7] получена оценка

$$\text{VCD}\big(f(F_1, \ldots, F_k)\big) \leqslant 2k \log(ek) \max_{i=1,\ldots,k} \big\{\text{VCD}(F_i)\big\}.$$

Использование pVCD метода (см. лемму 2) позволяет получить

$$\text{pVCD}\big(f(F_1, \ldots, F_k)\big) = \sum_{i=1}^{k} \text{pVCD}(F_i).$$

Оценивание VCD класса $\text{DNF}_{m,\mu,n}$

Обозначим $\text{DNF}_{m,\mu,n}$ — семейство булевых функций, представимых в виде ДНФ, содержащих не более чем μ конъюнкций над n переменными и не более m литералов.

$$\text{pVCD}(\text{DNF}_{m,\mu,n}) = m + (\mu - 1 + m)\lfloor \log(n + 1) \rfloor.$$

VCD класса бинарных решающих деревьев с μ листьями

Метод pVCD позволяет получить оценку

$$\text{pVCD}(\text{BFT}_{n,\mu}) = (\mu - 1)\big(\lfloor \log n \rfloor + \lfloor \log(\mu + 3) \rfloor\big)$$

для класса $\text{BFT}_{n,\mu}$ бинарных решающих деревьев с μ листьями; n — число булевых переменных. Логико-комбинаторным методом автору ранее удалось получить оценку $\text{VCD}(\text{BFT}_{n,\mu}) < \mu \log(n\mu)$.

Для класса $\text{BSP}_{n,\mu}$ композиций бинарных решающих деревьев не более чем с μ листьями и линейными предикатами во внутренних вершинах, зависящими от n числовых переменных, занимающих по M бит памяти каждая, pVCD оценка имеет вид

$$\text{pVCD}(\text{BSP}_{n,\mu}) = (\mu - 1)\big(\lfloor \log n \rfloor + \lfloor \log(\mu + 3) \rfloor + nM\big).$$

VCD структурной композиции линейного алгебраического корректора k эвристических моделей $F_1, \ldots, F_k$ (класс $L(F_1, \ldots, F_k)$)

Для совокупности эвристических алгоритмов с произвольным линейным корректором pVCD метод позволяет получить оценку

$$\text{pVCD}\big(L(F_1, \ldots, F_k)\big) = Mk + \sum_{i=1}^{k} \text{pVCD}(F_i).$$

Оценивание VCD интервального множественного автомата (IMA)

Класс решающих функций $\mathscr{F}_{\mathrm{IMA}}$, порождаемый IMA, описывается на основе следующих двух определений.

Определение 2 ([5]). *Множественным автоматом (MA) называется пятерка* $\langle Q, \Sigma, \delta, q_0, F\rangle$, *где* Q — *конечное множество состояний;* Σ — *конечный алфавит;* $\delta\colon Q \times \Sigma \to 2^Q$ — *множественная функция переходов;* $q_0 \in Q$ — *начальное состояние;* $F \subset Q$ — *множество финальных состояний. Последовательность* $p_0, p_1, \ldots, p_n$ *называется принимаемым путем для входа* $\omega_1, \ldots, \omega_n$, *если* $p_0 = q_0$, $p_i = \delta(p_{i-1}, \omega_i)$ *для любого* $i = 1, \ldots, n$ *и* $p_n \in F$. *Автомат MA вычисляет функцию* $f_{MA}\colon \Sigma^* \to \{0, 1\}$, *где* $f_{MA}(\omega) = 1$, *если число принимаемых путей для* $\omega = (\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_n)$ *является нечетным, и* $f_{MA}(\omega) = 0$, *если это число — четное.*

Определение 3 ([5]). *Интервальным множественным автоматом (IMA) называется пара* $\langle A, C\rangle$, *где* A — *множественный автомат с алфавитом* $\Sigma = \{0, \ldots, \mu - 1\}$, C — *множество, состоящее из* μ *вещественных чисел:* $C = \{c_0, \ldots, c_{\mu-1}\}$; $c_0 = -\infty$; $c_0 < c_1 < \cdots < c_{\mu-1}$. *Индексом числа* a, *обозначаемым* $\mathrm{ind}_C(a)$, *называется* $\max\{i\colon c_i \leqslant a\}$.

Функция $f_{\langle A,C\rangle}$, вычисляемая IMA $\langle A, C\rangle$, ставит в соответствие вещественной числовой последовательности $(x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ значение

$$f_A\big(\mathrm{ind}_C(x_1), \ldots, \mathrm{ind}_C(x_n)\big).$$

В работе [5] получена оценка

$$\mathrm{VCD}(\mathscr{F}_{\mathrm{IMA}}) = O\big(\mu(\log \mu + r^2)\big),$$

где $\mu = |\Sigma|$, $r = |Q|$. Сначала авторы [5] оценили сверху число способов обработки IMA входной последовательности как $\big(\mathrm{VCD}(\mathscr{F}_{\mathrm{IMA}}) \cdot n + 2\big)^{\mu} \cdot 2^{O(\mu r^2)}$, затем получили окончательный результат.

Применение pVCD метода дает существенно лучшую оценку

$$\mathrm{pVCD}(\mathscr{F}_{\mathrm{IMA}}) = \mu(M + r^2) + r.$$

Выводы

Приведенные примеры оценивания VCD классов алгоритмов эмпирического обобщения при помощи pVCD метода и сравнение полученных оценок с известными ранее оценками позволяют заключить, что pVCD метод дает не худшие, а иногда даже лучшие результаты, чем логико-комбинаторные методы, применяемые для оценивания емкости [1, 3, 4, 5, 7]. При этом оценки, получаемые pVCD методом, согласуются по своей структуре с известными из литературы оценками. Метод pVCD особенно эффективен для оценивания VCD классов сложных композиций алгоритмов эмпирического обобщения.

Литература

[1] *Вапник В. Н.* Восстановление зависимостей по эмпирическим данным. — М.: Наука, 1979. — 447 с.

[2] *Донской В. И.* Колмогоровская сложность классов общерекурсивных функций с ограниченной емкостью // Таврический вестник информатики и математики. — 2005. — № 1. — С. 25—34.

[3] *Матросов В. А.* Корректные алгебры ограниченной емкости над множествами некорректных алгоритмов // ДАН СССР. — 1980. — Т. 253, № 1. — С. 25–30.

[4] *Хайкин С.* Нейронные сети: полный курс. — М.: Из-во «Вильямс», 2006. — 995 с.

[5] *Beimel A., Kushilevitz E.* Learning Unions of High Dimentional Boxes over the Reals // Inf. Proc. Letters. — 2000. — Vol. 73, Issue 5–6. — Pp. 213–220.

[6] *Donskoy V. I.* The estimations based on the Kolmogorov Complexity and Machine Learning from Examples // Proc. of the 5-th Int. Conf. Neural Networks and Artificial Intelligence (ICNNAI'2008), Minsk: INNS, 2008. — Pp. 292–297.

[7] *Sontag E. D.* VC dimension of Neural Networks // In Neural Networks and Machine Learning. — Berlin: Springer, 1998. — Pp. 69–95.

Критерии полноты моделей алгоритмов нечёткой разметки точечных конфигураций*

Дорофеев Н. Ю.
cmc.nick@gmail.com
Москва, МГУ им. М. В. Ломоносова

В работе рассматриваются задачи синтеза обучаемых алгоритмов классификации точек в плоских конфигурациях. Описаны критерии полноты моделей и семейств алгоритмов.

Criteria of completeness of the algorithms for labeling point configurations*

Doropheev N. Y.
M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

The paper describes problems of the synthesis of trainable algorithms for classification of elements in point configuration. Criteria of completeness of the models and families of such algorithms are presented.

Введение

Рассматривается задача разметки точечных конфигураций. В этой задаче требуется построить обучаемый алгоритм, сопоставляющий точкам плоской конфигурации элементы некоторого конечного множества, называемого словарём разметки. Обучение алгоритма происходит на наборе заранее размеченных экспертом конфигураций. В работе [1] был предложен переход от дискретной постановки исследуемой задачи к непрерывной, а также показано, какие преимущества может дать такой переход. Там же были найдены критерии разрешимости и регулярности «непрерывных» задач.

Немаловажным вопросом является создание проблемно-ориентированной теории алгоритмов разметки точечных конфигураций. Рассматриваемая задача является частным случаем задач с теоретико-множественными ограничениями, в роли которых выступают аксиомы разметки. Проблемы полноты для задач синтеза обучаемых алгоритмов выделения трендов были исследованы в работах [2, 3, 4]. В работе исследуется, как изменятся полученные в работах [2, 3, 4] результаты при введении дополнительного требования локальности.

Разметка точечных конфигураций как задача с теоретико-множественными ограничениями

В соответствии с [4] будем рассматривать множество $\wp = \{S\}$, элементы которого называются объектами. В рассматриваемой задаче объектами являются точечные конфигурации, а точнее окрестности точек в точечных конфигурациях (подконфигурации с выделенной точкой). Точечная конфигурация — множество точек на плоскости. Типичный пример точечной конфигурации — временной ряд. Окрестностью в этом случае будет некоторая непрерывная часть временного ряда, одна из точек которой выделена как опорная. Описания объектов $D(S)$ образуют пространство начальных информаций $\mathfrak{I}_i = \{D(S) \mid S \in \wp\}$, с элементами I_i: $\mathfrak{I}_i = \{I_i\}$. Считается, что на пространстве $\mathfrak{I}_i$ задана некоторая метрика ρ_i.

Рассматривается задача синтеза алгоритмов A, реализующих отображения из пространства начальных информаций $\mathfrak{I}_i$ в пространство финальных информаций $\mathfrak{I}_f = \{I_f\}$. Финальные информации в данном случае являются метками, которые алгоритм разметки присваивает окрестностям. Причём, если изначально предполагалось, что метки принадлежат некоторому конечному множеству, называемому словарём разметки, то в работе [1] был предложен переход к пространству меток, элементами которого являются выпуклые комбинации меток из исходного словаря. Введение «смеси» меток позволило перейти от дискретного пространства финальных информаций к непрерывному. Предполагается, что на пространстве $\mathfrak{I}_f$ определена метрика ρ_f. Структурным параметром задачи является масштабирующая константа α, устанавливающая соответствие между метриками. Решение ищется в рамках модели алгоритмов $\mathfrak{M}$, где $\mathfrak{M} \subseteq \{A \mid A\colon \mathfrak{I}_i \to \mathfrak{I}_f\}$.

Нас будут интересовать алгоритмы, осуществляющие локальное отображение, т. е. алгоритмы, дополнительно удовлетворяющие условию $\rho_f\left(A(I_i^1), A(I_i^2)\right) \leqslant \alpha\rho_i(I_i^1, I_i^2)$. Это неравенство описывает естественное требование размечать «похожие» окрестности «похожими» метками (под «похожестью» подразумевается близость в заданной метрике). Задачи определяются структурными информациями I_s, выделяющими в $\mathfrak{M}$ подмножества допустимых отображений $\mathfrak{M}[I_s]$. Любой ло-

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 08-07-00304) и гранта Президента Российской Федерации для поддержки молодых ученых и кандидатов наук МК-7954.2010.9.

кальный алгоритм A, реализующий произвольное допустимое отображение, называется корректным для задачи, определяемой структурной информацией I_s, и является её решением.

Конструкции алгебраического подхода к проблеме синтеза корректных алгоритмов основаны на использовании «промежуточного» по отношению к $\mathfrak{I}_i$ и $\mathfrak{I}_f$ пространства оценок $\mathfrak{I}_e$. При этом корректные алгоритмы синтезируются на базе эвристических информационных моделей, т. е. параметрических семейств отображений из $\mathfrak{I}_i$ в $\mathfrak{I}_f$, представляющих собой специальные суперпозиции алгоритмических операторов (отображений из $\mathfrak{I}_i$ в $\mathfrak{I}_e$) и решающих правил (отображений из $\mathfrak{I}_e^p$ в $\mathfrak{I}_f$, p — арность решающего правила).

Модели $\mathfrak{M}$ определяются моделями алгоритмических операторов $\mathfrak{M}^0$, где

$$\mathfrak{M}^0 \subseteq \mathfrak{M}_* = \left\{B \;\middle|\; B\colon \mathfrak{I}_i \to \mathfrak{I}_e\right\},$$

и решающих правил

$$\mathfrak{M}^1 \subseteq \bigcup_{p=0}^{\infty} \left\{C \;\middle|\; C\colon \mathfrak{I}_p^e \to \mathfrak{I}^f\right\},$$

следующим образом:

$$\mathfrak{M} = \mathfrak{M}^1 \circ \mathfrak{M}^0 = \left\{C\circ(B_1 \times \ldots \times B_p)_\Delta \;\middle|\; C \in \mathfrak{M}^1,\ B_1, \ldots, B_p \in \mathfrak{M}^0\right\}.$$

Для синтеза корректных алгоритмов используются также множества $\mathfrak{F}$ корректирующих операции, определенных над множеством отображений $\mathfrak{M}_*$. Корректирующие операции F, рассматриваемые в настоящей работе, индуцируются операциями $\tilde{F}$ над пространством оценок $\mathfrak{I}_e$:

$$F(B_1, \ldots, B_p)(I_i) = \tilde{F}\big(B_1(I_i), \ldots, B_p(I_i)\big),$$

где I_i — произвольный элемент $\mathfrak{I}_i$, алгоритмические операторы $B_1, \ldots, B_p$ — произвольные отображения из $\mathfrak{I}_i$ в $\mathfrak{I}_e$ и $\tilde{F}$ — операция над $\mathfrak{I}_e$.

Для рассматриваемых задач с теоретико-множественными ограничениями модели алгоритмов $\mathfrak{M}$ строятся на базе параметрических семейств моделей алгоритмических операторов и корректирующих операций. При этом предполагается, что

$$\mathfrak{M}^0 = \left\{\mathfrak{M}^0_{\lambda,\omega} \;\middle|\; \lambda \in L,\ \omega \in W(\lambda)\right\},$$
$$\mathfrak{F} = \left\{\mathfrak{F}^\lambda \;\middle|\; \lambda \in L\right\},$$

где $W(\lambda)$ и L — множества структурных индексов. Модель $\mathfrak{M}$ строится в виде

$$\mathfrak{M} = \bigcup_{\lambda\in L} \bigcup_{\omega\in W(\lambda)} \mathfrak{M}^1 \circ \mathfrak{F}^\lambda\left(\mathfrak{M}^0_{\lambda,\omega}\right), \qquad (1)$$

где при всех $\lambda \in L$ и $\omega \in W$ выполнено равенство

$$\mathfrak{M}^1 \circ \mathfrak{F}^\lambda(\mathfrak{M}_0^{\lambda,\omega}) = \Big\{C \circ \big(F_1(B_1^1, \ldots, B_{r(1)}^1) \times \ldots \times F_p(B_1^p, \ldots, B_{r(p)}^p)\big)_\Delta \;\Big|\; C \in \mathfrak{M}^1,\ B_1, \ldots, B_p \in \mathfrak{M}^0\Big\}.$$

Для формализации понятия теоретико-множественных ограничений введем набор $\Pi = \{\pi_1, ..., \pi_k\}$ предикатов $\pi_i\colon \mathfrak{I}_i \times \mathfrak{I}_f \to \{0, 1\}$.

Пусть I_i^0 — произвольный элемент пространства $\mathfrak{I}_i$. Обозначим

$$\Pi\left(I_i^0\right) = \left\{I_f \;\middle|\; I_f \in \mathfrak{I}_f,\ \forall j\colon \pi_j\left(I_i^0, I_f\right)\right\}$$

— множество всех допустимых значений корректных алгоритмов для начальной информации I_i.

Сужение допустимых множеств

В общем случае для произвольно взятых окрестностей не всякие допустимые метки будут достаточно близки, чтобы удовлетворить требованию локальности. Следовательно требование локальности выделяет в множествах допустимых меток некоторые подмножества. Введём следующее множество:

$$R(I_i) = \Big\{I_f \in \Pi(I_i) \;\Big|\; \underset{N}{\forall}\, n\ \underset{\mathfrak{I}_i}{\forall} I_i^1, \ldots, I_i^n\ \exists\, I_f^1 \in \Pi\big(I_i^1\big), \ldots, I_f^n \in \Pi\big(I_i^n\big)\colon \underset{0,\ldots,n}{\forall} k_1, k_2\ \ \rho_f\big(I_f^{k_1}, I_f^{k_2}\big) \leqslant \alpha\rho_i\big(I_i^{k_1}, I_i^{k_2}\big)\Big\}.$$

Это множество является пересечением всех множеств «локально-допустимых» меток для данной окрестности относительно всевозможных прочих окрестностей.

Набор Π будем называть покрывающим, если для любого I_i из $\mathfrak{I}_i$ выполнено условие $R(I_i) \neq \varnothing$. В дальнейшем будем рассматривать произвольный фиксированный покрывающий набор Π.

Рассмотрим пример, иллюстрирующий множества $\Pi(I_i)$ и $R(I_i)$.

В качестве словаря разметки используем $M = \{\max, \min, \text{non}\}$. В этом случае пространство меток будет иметь следующий вид:

$$M^* = \Big\{\mu = (a_1, a_2, a_3) \;\Big|\; \forall i\ a_i \geqslant 0,\ \sum_{i=1}^{3} a_i = 1\Big\}.$$

Пусть в нашем распоряжении имеется набор из двух аксиом разметки:

$$\pi_1 = \big\{(x_i > x_{i-1}) \wedge (x_i > x_{i+1}) \Rightarrow a_1 > a_2\big\},$$
$$\pi_2 = \big\{(x_i < x_{i-1}) \wedge (x_i < x_{i+1}) \Rightarrow a_2 > a_1\big\}.$$

Рассмотрим конфигурацию, представленную на рис. 1. При $h \in (0, 1)$ получим конфигурацию I_i^1, а при $h < 0$ — конфигурацию I_i^2.

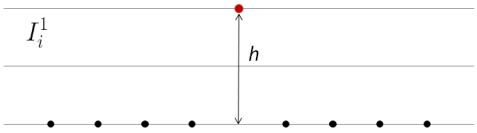


Рис. 1. Пример конфигурации.

В качестве ρ_i будем использовать среднеквадратичное отклонение. В качестве ρ_f возьмём евклидову метрику.

Для конфигурации I_i^1 и I_i^2 множества допустимых меток имеют вид

$$\Pi\left(I_i^1\right) = \left\{\mu \;\middle|\; \mu \in M^* \colon a_1 > a_2\right\};$$
$$\Pi\left(I_i^2\right) = \left\{\mu \;\middle|\; \mu \in M^* \colon a_1 < a_2\right\}.$$

В частности, $\mu_1 = (1,0,0) \in \Pi\left(I_i^1\right)$.

В то же время, μ_1 не входит в $R\left(I_i^1\right)$. Действительно, для всякого $\alpha > 0$ мы можем взять $h > 0$ достаточно малым, чтобы было выполнено условие:

$$\rho_f\left(\mu_1, \mu_2\right) > \alpha\rho_i\left(I_i^1, I_i^2\right),\ \forall \mu_2 \in \Pi\left(I_i^2\right).$$

При этом $R\left(I_i^1\right)$ не является пустым множеством. Для $\alpha = 1$, к примеру, метка $\mu = \left(\frac{h}{2}, 0, 1 - \frac{h}{2}\right)$ принадлежит $R\left(I_i^1\right)$.

Полнота семейств и моделей алгоритмов

В работе рассматриваются обучаемые алгоритмы. Для обучения алгоритма должны быть представлены заранее размеченные экспертами окрестности — «верные» пары из $\mathfrak{I}_i \times \mathfrak{I}_f$. Множество

$$\mathrm{Prec} = \Big\{\left((I_i^1, \ldots, I_i^q), (I_f^1, \ldots, I_f^q)\right) \subset \mathfrak{I}_i^q \times \mathfrak{I}_f^q \;\Big|\; q \in N,\ \underset{1,\ldots,q}{\forall} j \neq k\ \ I_i^j \neq I_i^k,\ \underset{1,\ldots,q}{\forall} j\ \ I_f^j \in \Pi\big(I_i^j\big)\Big\}$$

называется множеством наборов допустимых прецедентов.

Таким образом, полная модель должна содержать достаточно алгоритмов, чтобы отобразить произвольную окрестность из набора прецедентов в любую допустимую для неё метку. Это означает, что образ окрестности из набора прецедентов относительно модели должен включать в себя множество допустимых для неё меток. Требование локальности выделяет в множестве допустимых меток подмножество меток, которые не только являются допустимыми, но и в некотором смысле «хорошо» и «компактно» расположены, относительно заданной в пространстве меток метрики. Локальная модель для каждой окрестности из набора прецедентов должна покрывать это подмножество.

Ввиду того, что модель строится в виде суперпозиции, можно сформулировать требования отдельно для семейств решающих правил, корректирующих операций и моделей алгоритмических операторов, которые позволят в результате получить полную модель. Построение этих критериев осуществляется «с конца». Вначале из множества финальных информаций (меток) выделяются множества допустимых ответов для каждой окрестности из набора прецедентов. Далее уже из пространства оценок выделяется множество специального вида, все элементы которого переводятся решающими правилами только в допустимые ответы (метки). Для полноты семейства решающих правил необходимо, чтобы образ этого множества совпадал с множеством допустимых ответов для каждой окрестности из набора прецедентов. Затем в пространстве оценок ищется подмножество, которое с помощью корректирующих операций позволяет получить элементы построенного ранее множества и проверятся, покрыто ли оно целиком. Наконец, проверяется, позволяют ли алгоритмические операторы для всякой окрестности из набора прецедентов получить подмножество пространства оценок, построенное на предыдущем шаге. Стоит отметить, что подмножества, конструируемые на каждом шаге, во многом схожи с понятием базы, играющем важную роль в алгебраическом подходе.

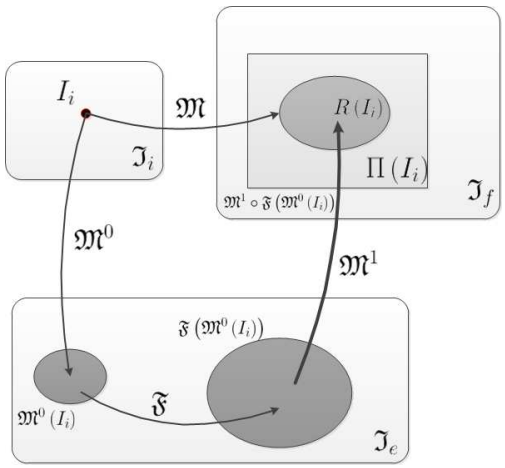


Рис. 2. Построение модели алгоритмов.

Построение модели можно изобразить в виде схемы, представленной на рис. 2.

Перейдём к формальному определению понятия полноты.

Модель $\mathfrak{M}$ называется П-полной, если выполнены условия:

$$\underset{\mathfrak{I}_i}{\forall} I_i \colon \mathfrak{M}(I_i) = \left\{A(I_i) \;\middle|\; A \in \mathfrak{M}\right\} \subseteq \Pi(I_i); \tag{2}$$

$$\underset{\mathrm{Prec}}{\forall}\left((I_i^1, \ldots, I_i^q), (I_f^1, \ldots, I_f^q)\right) \underset{\mathfrak{M}}{\exists} A \colon \quad \forall j\ A(I_i^j) = I_f^j; \tag{3}$$

$$\underset{\mathfrak{M}}{\forall} A\ \ \underset{\mathfrak{I}_i}{\forall} I_i, \widetilde{I}_i\ \ \rho_f\big(A(I_i), A(\widetilde{I}_i)\big) \leqslant \alpha\rho_i\big(I_i, \widetilde{I}_i\big). \tag{4}$$

Отметим, что условия (2), (3) и (4) независимы. Кроме того, при выполнении условия (3) усло-

вие (2) эквивалентно условию (1′):

$$\underset{\mathfrak{I}_i}{\forall} I_i : \mathfrak{M}(I_i) = \left\{ A(I_i) \;\middle|\; A \in \mathfrak{M} \right\} = \Pi(I_i). \qquad (1')$$

Напомним, что целью данной работы является описание условий, которым должны удовлетворять семейства $\mathfrak{M}^1$, $\mathfrak{F}$ и $\mathfrak{M}^0$, чтобы в совокупности обеспечивать полноту модели (1).

Нетрудно видеть, что изучение проблемы полноты модели $\mathfrak{M}$ можно проводить в предположении, что q равно 1. Действительно, для этого достаточно перейти от исходного пространства начальных информаций $\mathfrak{I}_i$ к $\bigcup\limits_{q=1}^{\infty} \mathfrak{I}_i^q$, от исходного пространства финальных информаций $\mathfrak{I}_f$ к $\bigcup\limits_{q=1}^{\infty} \mathfrak{I}_f^q$, и от исходных отображений $A \in \mathfrak{M}$, $A\colon \mathfrak{I}_i \to \mathfrak{I}_f$ к $A^*\colon \bigcup\limits_{q=1}^{\infty} \mathfrak{I}_i^q \to \bigcup\limits_{q=1}^{\infty} \mathfrak{I}_f^q$, где

$$A^*(I_i^1, \ldots, I_i^q) = \big(A(I_i^1), \ldots, A(I_i^q)\big).$$

Для изучения полноты модели требуется исследовать на полноту входящие в неё решающие правила, корректирующие операции и алгоритмические операторы.

Семейство решающих правил $\mathfrak{M}^1$ называется П-полным, если существуют модель алгоритмических операторов $\mathfrak{M}^0$ и семейство корректирующих операций $\mathfrak{F}$ такие, что модель (1) является П-полной.

Если семейство решающих правил не является П-полным, то на его основе не удастся построить и полную модель. Пусть теперь у нас зафиксировано некоторое П-полное семейство решающих правил.

При фиксированном П-полном семействе решающих правил $\mathfrak{M}^1$ семейство корректирующих операций $\mathfrak{F}$ называется $\mathfrak{M}^1$-П-полным, если существуют модель алгоритмических операторов $\mathfrak{M}^0$ такая, что модель (1) является П-полной.

Опять же, модель полна тогда и только тогда, когда входящие в неё корректирующие операции образуют $\mathfrak{M}^1$-П-полное семейство. Имея П-полное семейство решающих правил и $\mathfrak{M}^1$-П-полное семейство корректирующих операций, можно перейти к исследованию вопроса полноты алгоритмических операторов.

При фиксированном П-полном семействе решающих правил $\mathfrak{M}^1$ и $\mathfrak{M}^1$-П-полном семействе корректирующих операций $\mathfrak{F}$, модель алгоритмических операторов $\mathfrak{M}^0$ называется $\mathfrak{F}$-$\mathfrak{M}^1$-П-полной, если модель (1) является П-полной.

Введённые конструкции позволяют свести рассматриваемую задачу к задаче с теоретико-множественными ограничениями, что, в свою очередь, позволяет воспользоваться результатами, полученными в работах [2, 3].

Выводы

В работе были исследованы вопросы полноты задач разметки точечных конфигураций при введении дополнительного требования локальности. Было введено множество $R(I_i)$ описывающее сужение множества допустимых меток в результате исключения допустимых меток, не удовлетворяющих требованию локальности. Была показана нетривиальность этого множества.

В результате были получены соответствующие критерии полноты: П-полноты семейств решающих правил, $\mathfrak{M}^1$-П-полноты семейств корректирующих операций и $\mathfrak{F}$-$\mathfrak{M}^1$-П-полноты моделей алгоритмических операторов.

Литература

[1] *Дорофеев Н. Ю.* Разрешимость и регулярность задач нечёткой разметки точечных конфигураций // Математические методы распознавания образов ММРО-14, Москва: МАКС Пресс, 2009. — С. 29–32.

[2] *Рудаков К. В., Чехович Ю. В.* Критерии полноты моделей алгоритмов и семейств решающих правил для задач классификации с теоретико-множественными ограничениями // Доклады Академии наук. — 2003. — Т. 394, № 4. — С. 459–461.

[3] *Рудаков К. В., Чехович Ю. В.* Критерии полноты семейств корректирующих операций и моделей алгоритмических операторов для задач классификации с теоретико-множественными ограничениями // Доклады Академии наук. — 2003. — Т. 395, № 6. — С. 749–750.

[4] *Рудаков К. В., Чехович Ю. В.* Критерии полноты для задач классификации с теоретико-множественными ограничениями // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2005. — Т. 45, № 2. — С. 344–353.

Оценки степени корректных полиномиальных замыканий подмоделей модели АВО*

Дьяконов А. Г.
djakonov@mail.ru
Москва, факультет ВМК МГУ им. М. В. Ломоносова

Получены оценки степени корректного (который не делает ошибок на контрольной выборке) полинома над алгоритмами. В качестве модели алгоритмов, над которыми строятся полиномы, рассмотрены различные подмодели обобщённой модели алгоритмов вычисления оценок (АВО). Отдельно исследованы задачи классификации с непересекающимися классами и задачи с разнесёнными эталонами.

Bounds on the degrees of correct polynomial closures of CE-submodels*

D'yakonov A. G.
Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics of MSU, Moscow, Russia

The bounds on the degree of correct polynomial (which is correct on the control set) over algorithms are obtained. Different submodels of generalized estimation algorithms model are investigated. Classification problems with non-overlapped classes and "scatter train set" are also investigated.

Введение

В [1] были исследованы полиномиальные замыкания различных семейств алгоритмов, что положило начало развитию алгебраического подхода к решению задач распознавания. Идея алгебраического подхода заключается в ведении операций над алгоритмами распознавания (классификации) и поиске корректного алгоритма (который не делает ошибок на контрольной выборке) в виде алгебраического выражения. Было доказано (см. [1]), что корректный алгоритм может быть записан в виде полинома над алгоритмами вычисления оценок. Алгоритмы вычисления оценок (АВО) были предложены в [2, 3] как некоторая универсальная модель алгоритмов, по отношению к которой многие другие модели (линейные классификаторы, двухслойные нейросети, тестовые алгоритмы и т. д.) являются подмоделями при специальных ограничениях на значения параметров.

Корректные алгоритмы-полиномы, построенные в [1], имели степень асимптотически равную $q \log q$, где q — число объектов контрольной выборки задачи классификации. В [4] получена первая нетривиальная оценка на степень корректного полинома: $k \leqslant q + l - 2$, где k — степень полинома, l — число классов в задаче классификации, при этом была предложена новая техника, которая позволила в [5] получить также оценку $k \leqslant m$, где m — число объектов обучения. Значительное улучшение оценки степени с помощью методов теории категорий удалось получить в [6]: $k \leqslant \lfloor \log_2(ql) \rfloor$ (здесь и далее скобками $\lfloor \cdot \rfloor$ обозначается «целая часть снизу»).

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

Окончательно проблема оценки степени корректного полинома над алгоритмами модели АВО была закрыта в [7]: $k \leqslant \lfloor \log_2 q \rfloor + \lfloor \log_2 l \rfloor$, при этом такая оценка является неулучшаемой (объяснение этого термина см. ниже в теореме 2). В настоящем сообщении представлены оценки для различных частных случаев: подмоделей модели АВО и специальных типов задач распознавания.

Модель алгоритмов вычисления оценок

Пусть *множество допустимых объектов* M содержит объединение множеств K_j, $j = 1, \ldots, l$, называемых *классами*. Каждому объекту $S \in M$ соответствует бинарный *вектор классификации* $\tilde{\alpha}(S) = \big(\alpha_j(S)\big)_{j=1}^{l}$, где $\alpha_j(S)$ — значение предиката «$S \in K_j$», $j = 1, \ldots, l$. Для каждой пары $(S^t, S_i) \in \in M \times M$ можно вычислить значения функций

$$\rho_\Omega(S^t, S_i) \in \mathrm{E}_Z,\ \Omega \in \Omega_Z,$$

где Ω_Z — конечное множество параметров, E_Z — частично упорядоченное множество. В частности, функция ρ_Ω может быть метрикой (или полуметрикой) на множестве допустимых объектов. *Задача распознавания* состоит в том, чтобы построить алгоритм A, который по набору $\tilde{S}^m = \{S^t\}_{t=1}^m$ *эталонных* объектов с известными векторами $\{\tilde{\alpha}(S^t)\}_{t=1}^m$ для набора $\tilde{S}_q = \{S_t\}_{t=1}^q$ *контрольных* объектов строит их векторы классификаций — *классифицирует* (распознаёт).

Для решения задач распознавания часто применяется модель АВО (см. [3, 8]). Приведём описание обобщённой модели АВО. Алгоритм в ней является суперпозицией распознающего оператора B и решающего правила C: $A = B \cdot C$. Для объектов из $\tilde{S}_q$ оператор B получает матрицу $\Gamma[B] = \|\Gamma_{ij}[B]\|_{q \times l}$, ij-й элемент которой — *оценка при-*

надлежности объекта S_i к классу K_j:

$$\Gamma_{ij}[B] = \sum_{a,b=0,0}^{1,1} x_{abj} \sum_{\Omega\in\Omega_A} \sum_{S^t\in\tilde{K}_j^a} w^t w(\Omega) \mathrm{B}_\Omega^{\tilde{e},b}(S^t, S_i),$$

где $w^t \in \mathbb{R}^+ = \{x \in \mathbb{R} \mid x \geqslant 0\}$ при $t \in \{1,\ldots,m\}$ — *вес t-го объекта*, $w(\Omega) \in \mathbb{R}^+$ при $\Omega \in \Omega_A$ — *вес учёта Ω-й близости*, $\tilde{e} \in \mathrm{E}_Z$, $\mathrm{B}_\Omega^{\tilde{e},b}(S^t, S_i)$ — *функция близости* такая, что

$$\mathrm{B}_\Omega^{\tilde{e},1}(S^t, S_i) = 1 - \mathrm{B}_\Omega^{\tilde{e},0}(S^t, S_i) = \begin{cases} 1, & \rho_\Omega(S^t, S_i) \leqslant \tilde{e}; \\ 0, & \rho_\Omega(S^t, S_i) \nleqslant \tilde{e}, \end{cases}$$

$$\tilde{K}_j^a = \begin{cases} \tilde{S}^m \cap K_j, & a = 1; \\ \tilde{S}^m \backslash K_j, & a = 0. \end{cases}$$

В этой работе для простоты считаем, что $\Omega_A = \Omega_Z$ и $x_{ab} = x_{abj} \in \{0, (-1)^{a+b}\}$ для всех $j = 1,\ldots,l$, $(a,b) \in \{0,1\}^2$ (*модель без нормировок*). Простейшее решающее правило — *пороговое правило* C_c: $C_c\big(\|\Gamma_{ij}[B]\|_{q\times l}\big) = \|\alpha_{ij}\|_{q\times l}$,

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} 1, & \Gamma_{ij} \geqslant c, \\ 0, & \Gamma_{ij} < c, \end{cases}$$

$(i,j) \in \{1,\ldots,q\} \times \{1,\ldots,l\}$, $c \in \mathbb{R}$.

Часто рассматривают *признаковые задачи классификации*, в которых объект S задаётся своим признаковым описанием $f(S) = \big(f_i(S)\big)_{i=1}^n$. Такие задачи будем рассматривать для случая $f_i(S) \in \mathbb{R}$, $i \in \{1,\ldots,n\}$, применяя *модель АВО с системой всех одноэлементных опорных множеств*, в которой $\Omega_A = \{1,\ldots,n\}$, $\rho_\Omega(S,S') = |f_\Omega(S) - f_\Omega(S')|$ при $\Omega \in \Omega_A$ (объяснение терминологии см. в [3]).

Корректность и регулярность

Операции над распознающими операторами индуцируются операции над их матрицами оценок:

$$\Gamma[B_1 + B_2] = \Gamma[B_1] + \Gamma[B_2],$$
$$\Gamma[cB] = c\,\Gamma[B],$$
$$\Gamma[B_1 \cdot B_2] = \Gamma[B_1] \circ \Gamma[B_2],$$

умножение $\circ$ поэлементное. При фиксированном решающем правиле получаем алгебру над алгоритмами (например, сумма двух алгоритмов $B_1 \cdot C$, $B_2 \cdot C$ равна $(B_1 + B_2) \cdot C$). Множества распознающих операторов (как и множества алгоритмов) принято называть *моделями. Алгебраическим замыканием k-й степени* $\mathbf{U}^k(R^*)$ *модели* R^* называется множество полиномов (с нулевым свободным членом) степени не выше k над операторами модели R^*. *Алгебраическим замыканием* $\mathbf{U}(R^*)$ — множество всех полиномов, т. е.

$$\mathbf{U}(R^*) = \bigcup_{k=1}^{\infty} \mathbf{U}^k(R^*).$$

Через B^* будем обозначать множество операторов обобщённой модели АВО, а через $B^*(x_{ij})_{(i,j)\in P}$ — модель операторов АВО, у которых в формулах вычисления оценок $x_{ij} = 0$ при $(i,j) \notin P$. Например, $B^* = B^*(x_{11}, x_{10}, x_{01}, x_{00})$.

Определение 1. *Задача распознавания называется регулярной, если выполняются три условия регулярности:*

1) $\big|\{\tilde{K}_1^1,\ldots,\tilde{K}_l^1\}\big| = l$;
2) $\Big|\big\{\big(\rho_\Omega(S^t,S_i)\big)_{\Omega\in\Omega_A,\, t\in\{1,\ldots,m\}}\big\}_{i=1}^q\Big| = q$;
3) $\tilde{S}^m \cap \tilde{S}_q = \varnothing$.

Определение 2. *Модель распознающих операторов называется корректной (относительно задачи распознавания), если для любой матрицы из $\mathbb{R}^{q\times l}$ найдётся оператор модели, который её порождает.*

Корректность изначально была введена в [1, 3], чтобы формализовать способность модели АВО реализовать произвольную классификацию. Нетрудно видеть, что при пороговом решающем правиле корректность достаточна для реализации классификации в данной задаче. Позже было доказано, что это требование является также необходимым (см. [9]). Основной результат алгебраического подхода — корректность модели $\mathbf{U}(B^*)$ над множеством регулярных задач. Его более строгая формулировка: модель $\mathbf{U}(B^*)$ корректна тогда и только тогда, когда выполняются первые два условия регулярности.

Задача об оценке степени корректного полинома эквивалентна задаче об оценке степени корректного алгебраического замыкания: если замыкание $\mathbf{U}^k(B^*)$ корректно, то любой корректный полином имеет степень не больше k.

Оценки для подмоделей АВО

В общем случае оценку степени корректного алгоритма даёт

Теорема 1 ([7]). *Модель $\mathbf{U}(B^*)$ корректна тогда и только тогда, когда корректна модель $\mathbf{U}^k(B^*)$, где $k \geqslant \lfloor\log_2 q\rfloor + \lfloor\log_2 l\rfloor$.*

«Неулучшаемость» оценки формализует

Теорема 2 ([7]). *Для любых натуральных q и l, $q + l > 2$, существует (регулярная) задача распознавания, в которой модель $\mathbf{U}^k(B^*)$ некорректна при $k < \lfloor\log_2 q\rfloor + \lfloor\log_2 l\rfloor$.*

Ниже исследуем подмодели вида $B^*(x_{ij})_{(i,j)\in P}$.

Лемма 3. *Для всех натуральных k справедливы равенства*

$$\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11},x_{10},x_{01},x_{00})\big)=\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11},x_{10},x_{01})\big)=$$
$$=\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11},x_{01},x_{00})\big)=\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11},x_{01})\big),$$
$$\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11},x_{10},x_{00})\big)=\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11},x_{00})\big),$$
$$\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11},x_{10})\big)=\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11})\big).$$

Отсюда следует, что подмодели разбиваются на три класса (с точностью до равенства алгебраических замыканий). Для подмоделей первого класса верна оценка общего случая (теоремы 1, 2). Подмодели второго класса в практически интересных случаях эквивалентны подмоделям первого, что показывает следующая

Лемма 4. *Если выполнено третье условие регулярности и* $\exists\Omega\in\Omega_A$: $\forall(S,S')\in M\times M$

$$\rho_\Omega(S,S')\leqslant\rho_\Omega(S,S)\quad\Rightarrow\quad S=S',$$

тогда

$$\mathbf{U}^k(B^*)=\mathbf{U}^k\big(B^*(x_{11},x_{00})\big).$$

Условия леммы выполняются, например, если одна из функций ρ_Ω является метрикой. Также выполнение этого условия эквивалентно наличию в $\mathbf{U}^1(B^*)$ оператора, который получает матрицу оценок с попарно равными элементами.

Теорема 5. *Пусть в задаче распознавания выполнено первое условие регулярности и*

$$\forall j\in\{1,\dots,l\}\quad\Big|\Big\{\big(\rho_\Omega(S^t,S_i)\big)_{S^t\in K_j,\ \Omega\in\Omega_A}\Big\}_{i=1}^{q}\Big|=q$$

(второе условие регулярности для модели $B^*(x_{11})$), тогда модель $\mathbf{U}^k(B^*(x_{11}))$ корректна при

$$k\geqslant\min\big\{\lfloor\log_2(ql+1)\rfloor,\ \lfloor\log_2(q)\rfloor+\lfloor\log_2(l+1)\rfloor\big\}.$$

Вопрос о неулучшаемой оценке замыкания из теоремы 5 пока остаётся открытым (видимо, оценка теоремы 1 справедлива и для этого случая).

Оценки для задачи с непересекающимися классами

В задаче с l непересекающимися классами, $l\geqslant 2$, каждому объекту $S\in M$ соответствует вектор классификации $\tilde\alpha(S)$ ровно с одной единицей (в позиции с номером класса, которому принадлежит объект).

Теорема 6. *В задаче с l непересекающимися классами модель $\mathbf{U}(B^*)$ корректна тогда и только тогда, когда корректна модель $\mathbf{U}^k(B^*)$, где*

$$k\geqslant\begin{cases}\max\{\lfloor\log_2 q\rfloor,\ 1\}, & l=2;\\ \lfloor\log_2 q\rfloor+1, & l>2.\end{cases}$$

Оценки теоремы 6 являются неулучшаемыми. Несмотря на кажущуюся простоту оценок, существуют публикации с неверными оценками степени в задачах с непересекающимися классами, что, видимо, связано с нетривиальностью эффективных критериев корректности модели ABO в этом случае.

Интересно, что полином минимальной степени k всегда можно найти в виде

$$\sum_i c_i B_i^k \tag{1}$$

(что «очень напоминает» классические полиномы Ю. И. Журавлёва [1]). В этой сумме каждый оператор B_i является линейной комбинацией операторов из B^*. В общем случае (для произвольной задачи) слагаемых в сумме не более ql (хотя эта оценка достаточно грубая и получение более точной оценки остаётся открытой проблемой). В задаче с двумя непересекающимися классами оценка на число слагаемых в (1) может быть уменьшена в два раза.

Задачи с разнесёнными эталонами

Определение 3. *Признаковая задача распознавания называется задачей с разнесёнными эталонами, если для любого признака $r\in\{1,\dots,n\}$ найдутся эталонные объекты S^{t_1}, S^{t_2} с равными или противоположными векторами классификации, для которых $f_r(S^{t_1})\neq f_r(S^{t_2})$.*

Здесь для вектора $\tilde\alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_l)$ противоположным называем вектор $(1-\alpha_1,\dots,1-\alpha_l)$. Такие задачи упоминались, в частности, в [10], где модель ABO исследовалась для двух непересекающихся классов.

Задачи с разнесёнными эталонами обладают рядом интересных алгебраических свойств. Например, в них добавление новых эталонных объектов не оказывает влияние на корректность алгебраических замыканий модели ABO. В общем случае этот результат не имеет места, более того, эталонные объекты можно добавить так, что уже замыкание первой степени модели будет корректным. Кроме того, в этих задачах удаётся существенно понизить оценку степени корректного алгебраического замыкания ABO.

Теорема 7. *В регулярной задаче с разнесенными эталонами алгебраическое замыкание k-й степени модели ABO с системой всех одноэлементных опорных множеств корректно при*

$$k\geqslant\max\big\{\min\{n,\lfloor\log_2 q\rfloor\},\lfloor\log_2 l\rfloor\big\}.$$

Оценка степени является неулучшаемой.

Литература

[1] *Журавлёв Ю. И.* Корректные алгоритмы над множествами некорректных (эвристических) алгоритмов. II // Кибернетика. — 1977. — № 6. — С. 21–27.

[2] *Журавлёв Ю. И., Никифоров В. В.* Алгоритмы распознавания, основанные на вычислении оценок // Кибернетика. — 1971. — № 3. — С. 1–11.

[3] *Журавлёв Ю. И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Пробл. кибернетики. — 1978. — Вып. 33. — С. 5–68.

[4] *Матросов В. Л.* Корректные алгебры алгоритмов распознавания ограниченной емкости : Дис. докт. физ.-матем. наук. М. Гос. пед. инст-т им. В. И. Ленина, 1985.

[5] *Плохонина Т. В.* О некорректности алгебраического замыкания второй степени семейства алгоритмов вычисления оценок // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1985. — Т. 25. № 7. — С. 1073–1086.

[6] *Рудаков К. В.* Об алгебраической теории универсальных и локальных ограничений для задач классификации // Распознавание, классификация, прогноз. — М.: Наука, 1989. — Вып. 1. — С. 176–201.

[7] *Дьяконов А. Г.* Алгебра над алгоритмами вычисления оценок: минимальная степень корректного алгоритма // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2005. — Т. 45. — № 6. — С. 1134–1145.

[8] *Журавлёв Ю. И, Рязанов В. В., Сенько О. В.* «РАСПОЗНАВАНИЕ». Математические методы. Программная система. Практические применения. — М.: Фазис, 2006. — 176 с.

[9] *Дьяконов А. Г.* Корректность относительно семейства решающих правил // Искусственный интеллект — 2006. — № 2. — С. 61–64.

[10] *Карпович П. А., Дьяконов А. Г.* Критерий k-сингулярности систем точек в алгебраическом подходе к распознаванию // 14-я Всероссийская конференция «Математические методы распознавания образов»: Сборник докладов. — С. 41–44.

О сложности перечисления элементарных классификаторов в логических процедурах распознавания*

Дюкова Е. В., Сотнезов Р. М.
edjukova@mail.ru , rom.sot@gmail.com
Москва, Учреждение Российской академии наук Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН

Рассмотрены вопросы вычислительной сложности процедур распознавания, основанных на поиске покрытий булевых и целочисленных матриц. Получена асимптотика типичного числа неприводимых покрытий для случая, когда число строк m в булевой матрице не меньше числа столбцов n. Как следствие получена асимптотика типичного числа максимальных конъюнкций монотонной булевой функции от n переменных, заданной конъюнктивной нормальной формой из m элементарных дизъюнкций. Приведены аналогичные оценки для числа тупиковых покрытий целочисленной матрицы (числа максимальных конъюнкций двузначной логической функции, заданной множеством нулей).

On the complexity of genereation elementary classifiers in logical procedures of recognition*

Djukova E. V., Sotnezov R. M.
Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russia

Questions of computational complexity of recognition procedures based on the search of coverings of Boolean and integer matrixes are considered. The asymptotic of the typical number of irreducible coverings for the case when the number of rows m in a Boolean matrix is not less than the number of columns n is received. As a consequence the asymptotic of the typical number of maximal conjunctions of a monotone Boolean function of n variables, given in conjunctive normal form of m elementary disjunctions is received. Analogous estimations for the number of deadlock coverings of an integer matrix (number of maximum conjunctions of two-valued logic function given by set of zero) are resulted.

Актуальность проблематики следует из необходимости разработки эффективных методов решения сложных дискретных задач, возникающих при конструировании логических процедур распознавания.

В классе дискретных задач перечисления, требующих больших вычислительных затрат, центральное место принадлежит задаче дуализации — задаче поиска максимальных конъюнкций монотонной булевой функции, заданной конъюнктивной нормальной формой (к.н.ф.). В матричной формулировке — это задача построения (перечисления, порождения) неприводимых покрытий булевой матрицы. Поиски эффективных алгоритмов для перечисления неприводимых покрытий булевой матрицы ведутся с середины прошлого века [1]. В [2, 3] предложен подход к синтезу асимптотически оптимальных алгоритмов для рассматриваемой задачи, продемонстрированный на примерах реализации тестовых алгоритмов распознавания и алгоритмов распознавания типа «Кора».

В распознавании образов при логическом анализе целочисленных данных могут быть использованы также методы синтеза нормальных форм для двузначных логических функций, являющихся характеристическими функциями классов. В [4–8] построены асимптотически оптимальные алгоритмы для задач поиска максимальных конъюнкций двузначных логических функций, которые сформулированы как задачи перечисления тупиковых покрытий строк целочисленной матрицы ее столбцами.

Обоснование асимптотически оптимальных алгоритмов перечисления тупиковых покрытий булевых и целочисленных матриц базируется на изучении метрических (количественных) свойств множества покрытий (получении асимптотических оценок для типичных значений количественных характеристик множества покрытий).

Технические основы получения указанных оценок были заложены в работах [10, 11] и затем развиты в работах [2–9,12–17].

Наиболее подробно исследован случай, когда число строк в матрице достаточно мало по сравнению с числом столбцов. Показано, что если $m^\alpha \leqslant n \leqslant 2^{m^\beta}$, $\alpha > 1$, $\beta < 1$, то при $n \to \infty$ для почти всех булевых матриц размера $m \times n$ число неприводимых покрытий асимптотически равно числу единичных подматриц [2–7]. Аналогичный результат имеет место и для числа тупиковых покрытий целочисленной матрицы [4–7].

В [12, 13] приведены асимптотики типичного числа покрытий целочисленной матрицы и типичного числа покрытий целочисленной матрицы с длиной, близкой к минимальной.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 10-01-00770) и гранта президента РФ по поддержке ведущих научных школ НШ-7950.2010.1.

В настоящей работе получена асимптотика типичного числа неприводимых покрытий булевой матрицы размера $m \times n$ в случае $n \leqslant m$. Приведена аналогичная оценка для типичного числа тупиковых покрытий целочисленной матрицы. Ранее для случая $n \leqslant m$ была известна лишь асимптотика типичного значения логарифма числа тупиковых покрытий целочисленной матрицы.

Основные понятия

Пусть L — булева матрица, H — набор столбцов матрицы L. Набор столбцов H называется *неприводимым покрытием*, если выполнены следующие два условия:

1) подматрица L^H матрицы L, образованная столбцами набора H, не содержит строки вида $(0, 0, \ldots, 0)$;
2) L^H содержит каждую из строк вида $(1, 0, \ldots, 0)$, $(0, 1, \ldots, 0), \ldots, (0, 0, \ldots, 1)$, т. е. L^H содержит единичную подматрицу.

Если выполнено только условие 1), то набор столбцов H называется *покрытием* матрицы L.

Приведем более общее понятие тупикового покрытия целочисленной матрицы.

Пусть M_{mn}^k — множество всех матриц размера $m \times n$ с элементами из $\{0, 1, \ldots, k-1\}$, $k \geqslant 2$. Обозначим через E_r^k, $k \geqslant 2$, $r \leqslant n$, множество всех наборов вида $(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$, где $\sigma_i \in \{0, 1, \ldots, k-1\}$.

Пусть $L \in M_{mn}^k$, H — набор столбцов матрицы L, $\sigma \in E_r^k$, $\sigma = (\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$. Набор столбцов H называется *тупиковым σ-покрытием*, если выполнены следующие два условия:

1) подматрица L^H матрицы L, образованная столбцами набора H, не содержит строку σ;
2) для каждого $p \in \{1, 2, \ldots, r\}$ подматрица L^H содержит по крайней мере одну из строк вида $(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_r) \in E_k^r$, где $\beta_p \neq \sigma_p$ и $\beta_j = \sigma_j$ при $j \in \{1, 2, \ldots, r\} \setminus \{p\}$, т. е. L^H содержит *σ-подматрицу*.

Если выполнено только условие 1), то набор столбцов H называется *σ-покрытием* матрицы L. Число r называется *длиной* набора H.

Нетрудно видеть, что понятие (тупикового) $(0, 0, \ldots, 0)$-покрытия булевой матрицы совпадает с понятием (неприводимого) покрытия булевой матрицы. Отметим, что $(0, 0, \ldots, 0)$-подматрица булевой матрицы является единичной подматрицей.

Пусть $L \in M_{mn}^k$. Положим $S(L, \sigma)$, $\sigma \in E_k^r$ — множество всех σ-подматриц матрицы L, $C(L, \sigma)$, $\sigma \in E_k^r$ — множество всех σ-покрытий матрицы L, $B(L, \sigma)$, $\sigma \in E_k^r$ — множество всех тупиковых σ-покрытий матрицы L. Пусть далее

$$S_r(L) = \bigcup_{\sigma \in E_k^r} S(L, \sigma), \quad S(L) = \bigcup_{r=1}^{n} S_r(L),$$

$$C_r(L) = \bigcup_{\sigma \in E_k^r} C(L, \sigma), \quad C(L) = \bigcup_{r=1}^{n} C_r(L),$$

$$B_r(L) = \bigcup_{\sigma \in E_k^r} B(L, \sigma), \quad B(L) = \bigcup_{r=1}^{n} B_r(L),$$

$r_1(k) = [\log_k m - \log_k \ln \log_k m - 1]$,

$r_2(k) =]l \log_k m + c[$,

$c = \log_k \log_k m + \log_k \log_k \log_k n$,

$p_r(k) = \exp(-mk^{-r})(1 - \exp(-mk^{-r}))^r$,

$f_n \approx g_n$, $n \to \infty$ означает, что $f_n = g_n(1 + \delta_n)$, где $\delta_n \to 0$ при $n \to \infty$;

$f_n \lesssim g_n$, $n \to \infty$ означает, что $f_n \leqslant g_n(1 + \delta_n)$, где $\delta_n \to 0$ при $n \to \infty$;

$|V|$ — мощность множества V.

В случае $L \in M_{mn}^2$ положим $S(L, 0)$ — множество всех единичных подматриц матрицы L, $S_r(L, 0)$ — множество всех единичных подматриц порядка r матрицы L, $C(L, 0)$ — множество всех $(0, \ldots, 0)$-покрытий матрицы L, $C_r(L, 0)$ — множество всех $(0, \ldots, 0)$-покрытий длины r матрицы L, $B(L, 0)$ — множество всех неприводимых покрытий матрицы L, $B_r(L, 0)$ — множество всех неприводимых покрытий длины r матрицы L, $r_1 = r_1(2)$, $r_2 = r_2(2)$, $p_r = p_r(2)$.

Основные результаты

Далее высказывание типа «для почти всех матриц L из M_{mn}^k при $n \to \infty$ выполнено асимптотическое равенство $F(L) \approx G(L)$» означает, что существуют две положительные бесконечно убывающие функции $\alpha(n)$ и $\beta(n)$ такие, что для всех достаточно больших n выполнено $1 - |M|/|M_{mn}^k| \leqslant \alpha(n)$, где M — множество матриц L из M_{mn}^k, для которых выполнено $1 - \beta(n) \leqslant F(L)/G(L) \leqslant 1 + \beta(n)$.

Теорема 1. *Если $n \leqslant m \leqslant 2^{n^\beta}$, $\beta < 1/2$, то при $n \to \infty$ для почти всех матриц L из M_{mn}^2 справедливо*

1) $|B(L, 0)| \approx \sum\limits_{r=r_1}^{r_2} |B_r(L, 0)| \approx \sum\limits_{r=r_1}^{r_2} C_n^r p_r$;
2) $\sum\limits_{r \geqslant r_2} |S_r(L, 0)| \approx |S_{r_2}(L, 0)| \approx \sum\limits_{r \geqslant r_2}^{k} |B_r(L, 0)| \approx |B_{r_2}(L, 0)| \approx C_n^{r_2} p_{r_2} \approx C_n^{r_2} \left(1 - e^{-m2^{-r_2}}\right)^{r_2}$;
3) *длины почти всех покрытий из $B(L, 0)$ принадлежат интервалу $[r_1, r_2]$.*

Теорема 2. *Если $m \leqslant 2^{n^\beta}$, $\beta < 1/2$, то при $m, n \to \infty$ для почти всех матриц L из M_{mn}^2 спра-*

ведливо

$$\sum_{r\leqslant r_1}|C_r(L,0)|\approx|C_{r_1}(L,0)|\approx\sum_{r\leqslant r_1}|B_r(L,0)|\approx$$
$$\approx|B_{r_1}(L,0)|\approx C_n^{r_1}p_{r_1}\approx C_n^{r_1}\exp(-m2^{-r_1});$$

Доказательство теорем 1 и 2 опирается на ряд приводимых ниже лемм.

Будем считать $M_{mn}^2=\{L\}$ пространством элементарных событий, в котором каждое событие L происходит с вероятностью $1/|M_{mn}^2|=1/2^{mn}$.

Через $\mathsf{E}X(L)$ будем обозначать математическое ожидание случайной величины $X(L)$, через $\mathsf{D}X(L)$ — дисперсию случайной величины $X(L)$.

Лемма 3. *[10] Пусть для случайных величин $X_1(L)$ и $X_2(L)$, определенных на M_{mn}^2, выполнено $X_1(L)\geqslant X_2(L)\geqslant 0$, $\mathsf{E}X_2(L)>0$ и при $n\to\infty$ верно $\mathsf{E}X_1(L)\approx\mathsf{E}X_2(L)$, $\mathsf{D}X_2(L)/(\mathsf{E}X_2(L))^2\to 0$. Тогда для почти всех матриц L из M_{mn}^2 имеет место $X_2(L)\approx X_1(L)\approx\mathsf{E}X_2(L)$, $n\to\infty$.*

Лемма 4. *Если $r\geqslant r_1$, то при $n\to\infty$ имеет место*

$$\mathsf{E}|B_r(L,0)|\approx C_n^r p_r.$$

Лемма 5. *Если $n\leqslant m$, то при $n\to\infty$ имеет место*

$$\sum_{r\geqslant r_2}\mathsf{E}|S_r(L,0)|\approx\mathsf{E}|S_{r_2}(L,0)|\approx\sum_{r\geqslant r_2}\mathsf{E}|B_r(L,0)|\approx$$
$$\approx\mathsf{E}|B_{r_2}(L,0)|\approx C_n^{r_2}p_{r_2}\approx C_n^{r_2}(1-\exp(-m2^{-r_2}))^{r_2};$$

Лемма 6. *Если $m\leqslant 2^{n^\beta}$, то при $m,n\to\infty$ имеет место*

$$\sum_{r\geqslant r_2}\mathsf{E}|S_r(L,0)|\approx\mathsf{E}|S_{r_2}(L,0)|\approx\sum_{r\geqslant r_2}\mathsf{E}|B_r(L,0)|\approx$$
$$\approx\mathsf{E}|B_{r_2}(L,0)|\approx C_n^{r_2}p_{r_2}\approx C_n^{r_2}\big(1-\exp(-m2^{-r_2})\big)^{r_2};$$

Лемма 7. *Если $r\leqslant r_2$, $m\leqslant 2^{n^\beta}$, $\beta<1/2$, то при $n\to\infty$ имеет место*

$$\frac{\mathsf{D}|B_r(L,0)|}{(\mathsf{E}|B_r(L,0)|)^2}\lesssim n^{2\beta-1}.$$

Пусть $\theta=\sqrt{n^{2\beta-1}\log n}$, $\eta_r(L)=|B_r(L,0)|$, $\beta<1/2$. Применяя неравенство Чебышева

$$\mathsf{P}\big(|\eta_r(L)-\mathsf{E}\eta_r(L)|\geqslant\theta\mathsf{E}\eta_r(L)\big)\leqslant\frac{\mathsf{D}\eta_r(L)}{\theta^2(\mathsf{E}\eta_r(L))^2}$$

к каждому r из отрезка $[r_1,r_2]$, получаем в силу лемм 4 и 7 утверждения 1) и 3) теоремы 1. Из лемм 3, 5 и 7 следует утверждение 2) теоремы 1. Из лемм 3, 6 и 7 следует утверждение теоремы 2.

Аналогично теореме 1 доказывается

Теорема 8. *Если $n\leqslant m\leqslant k^{n^\beta}$, $\beta<1/2$, то при $n\to\infty$ для почти всех матриц L из M_{mn}^k справедливо*

1) $|B(L)|\approx\sum\limits_{r=r_1(k)}^{r_2(k)}|B_r(L)|\approx\sum\limits_{r=r_1(k)}^{r_2(k)}C_n^r p_r(k)$;
2) $\sum\limits_{r\geqslant r_2(k)}|S_r(L)|\approx|S_{r_2(k)}(L)|\approx\sum\limits_{r\geqslant r_2(k)}|B_r(L)|\approx$
$\approx|B_{r_2(k)}(L)|\approx C_n^{r_2(k)}p_{r_2}(k)\approx$
$\approx C_n^{r_2(k)}\big(1-\exp(-mk^{-r_2(k)})\big)^{r_2(k)}$;
3) *длины почти всех покрытий из $B(L)$ принадлежат интервалу $[r_1(k),r_2(k)]$.*

Аналогично теореме 2 доказывается

Теорема 9. *Если $m\leqslant k^{n^\beta}$, $\beta<1/2$, то при $m,n\to\infty$ для почти всех матриц L из M_{mn}^k справедливо*

$$\sum_{r\leqslant r_1(k)}|C_r(L)|\approx|C_{r_1(k)}(L)|\approx\sum_{r\leqslant r_1(k)}|B_r(L)|\approx$$
$$\approx|B_{r_1(k)}(L)|\approx C_n^{r_1(k)}\exp(-mk^{-r_1(k)});$$

Замечание 1. Теорема 4 доказана в [13] более сложным способом.

Техника доказательства теорем 3 и 4 использована для оценки типичного числа максимальных конъюнкций монотонной булевой функции $F(x_1,\ldots,x_n)$, заданной конъюнктивной нормальной формой

$$D_1\ \&\ \ldots\ \&\ D_m,\qquad(1)$$

где D_i, $i=1,\ldots,m$ — элементарная дизъюнкция над переменными $x_1,\ldots,x_n$.

Через N_F и $N_{\bar F}$ обозначим соответственно множество единиц и множество нулей функции F.

Через N_B обозначим интервал истинности элементарной конъюнкции B.

Элементарную конъюнкцию B назовем *допустимой* для F, если $N_B\cap N_F\neq\varnothing$ и $N_B\cap N_{\bar F}=\varnothing$.

Элементарную конъюнкцию B назовем *максимальной* для F, если она является допустимой и не существует допустимой элементарной конъюнкции B' такой, что $N_{B'}\supset N_B$.

Пусть $L_F=(a_{ij})$, $i=1,\ldots,m$, $j=1,\ldots,n$ — булева матрица, в которой $a_{ij}=1$, если D_i содержит переменную x_j, и $a_{ij}=0$ в противном случае.

Лемма 10. *Элементарная конъюнкция $x_{j_1},\ldots,x_{j_r}$ является максимальной для F тогда и только тогда, когда набор столбцов матрицы L_F с номерами $j_1,\ldots,j_r$ является неприводимым покрытием.*

Лемма 11. *Если $n\leqslant m\leqslant 2^{n^\beta}$, $\beta<1$ то почти все матрицы из M_{mn}^2 при $n\to\infty$ являются матрицами с попарно различными строками.*

Обозначим через N_{mn}^2 множество всех булевых функций вида 1 от n переменных. Через $l(F)$ будем обозначать число максимальных конъюнкций функции F из N_{mn}^2 (длину сокращенной д.н.ф.

функции F), через $l_r(F)$ — число максимальных конъюнкций ранга r функции F.

Из лемм 10 и 11 и теоремы 1 сразу следует

Теорема 12. *Если $n \leqslant m \leqslant 2^{n^\beta}$, $\beta < 1/2$, то при $n \to \infty$ для почти всех функций F из N_{mn}^2 справедливо*

1) $l(F) \approx \sum\limits_{r=r_1}^{r_2} l_r(F) \approx \sum\limits_{r=r_1}^{r_2} C_n^r p_r$;
2) $\sum\limits_{r \geqslant r_2} l_r(F) = \sum\limits_{r \geqslant r_2} l_r(F) \approx l_{r_2}(F) \approx C_n^{r_2} p_{r_2} \approx \approx C_n^{r_2}\left(1 - (1 - 2^{-r_2})^m\right)^{r_2}$;
3) *ранги почти всех максимальных конъюнкций функции F принадлежат интервалу $[r_1, r_2]$.*

Из лемм 10 и 11 и теоремы 2 сразу следует

Теорема 13. *Если $m \leqslant 2^{n^\beta}$, $\beta < 1/2$, то при $m, n \to \infty$ для почти всех функций F из N_{mn}^2 справедливо*

$$\sum_{r \leqslant r_1} l_r(F) = \sum_{r \leqslant r_1} l_r(F) \approx l_{r_1}(F) \approx \approx C_n^{r_1} p_{r_1} \approx C_n^{r_1}\left(1 - 2^{-r_1}\right)^m.$$

Выводы

Рассмотрены вопросы эффективной реализации логических процедур распознавания, основанных на построении покрытий булевой матрицы. Получена асимптотика типичного числа неприводимых покрытий булевой матрицы для случая, когда число строк m в булевой матрице не меньше числа столбцов n. Показано, что в этом случае число покрытий и неприводимых покрытий, длины которых не превосходит r_1, асимптотически совпадают, а число неприводимых покрытий булевой матрицы с длиной не меньше чем r_2 асимптотически совпадает с числом единичных подматриц, у которых порядок не меньше чем r_2. Как следствие, получена асимптотика типичного числа максимальных конъюнкций монотонной булевой функции от n переменных, заданной конъюнктивной нормальной формой из m дизъюнкций. Приведены аналогичные оценки для числа тупиковых покрытий целочисленной матрицы (числа максимальных конъюнкций двузначной логической функции, заданной множеством нулей).

Литература

[1] *Чегис И. А., Яблонский С. В.* Тр. МИАНС. — Город: Издательство, 2007. — 314 с.

[2] *Дюкова Е. В.* Об асимптотически оптимальном алгоритме построения тупиковых тестов // ДАН СССР. — 1977. — Т. 233, № 4. — С. 527–530.

[3] *Дюкова Е. В.* Асимптотически оптимальные тестовые алгоритмы в задачах распознавания // Проблемы кибернетики. М: Наука.— 1982. — Вып. 39 — С. 165–169.

[4] *Дюкова Е. В.* О сложности реализации некоторых процедур распознавания // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1987. — Т. 45, № 5. — С. 938–943.

[5] *Дюкова Е. В.* Алгоритмы распознавания типа «Кора»: сложность реализации и метрические свойства // Распознавание, классификация, прогноз (матем. методы и их применение). М.: Наука. — 1989. — Вып. 2 — С. 99–125.

[6] *Дюкова Е. В., Журавлев Ю. И.* Дискретный анализ признаковых описаний в задачах распознавания большой размерности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2000. — Т. 40, № 8. — С. 1264–1278.

[7] *Дюкова Е. В.* О сложности реализации дискретных (логических) процедур распознавания // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2004. — Т. 44, № 3. — С. 550–572.

[8] *Дюкова Е. В., Инякин А. С.* Асимптотически оптимальное построение тупиковых покрытий целочисленной матрицы // Математические вопросы кибернетики. М: Наука.— 2008. — № 17 — С. 235–246.

[9] *Djukova E. V., Nefedov V. Yu.* The Complexity of Transformation of Normal Forms for Characteristic Functions of Classes // Pattern Recognition and Image Analysis — 2009. — Vol. 19, № 3. — pp. 435–440.

[10] *Носков В. Н., Слепян В. А.* О числе тупиковых тестов для одного класса таблиц // Кибернетика. Киев.— 1972. — № 1 — С. 60–65.

[11] *Сапоженко А. А.* Оценка числа тупиковых д.н.ф. для почти всех не всюду определенных булевых функций // Математические заметки.— 1980. — № 2., Т. 28— С. 279–299.

[12] *Дюкова Е. В., Песков Н. В.* Построение распознающих процедур на базе элементарных классификаторов // Математические вопросы кибернетики.— 2005. — № 14 — С. 57–92.

[13] *Дюкова Е. В., Инякин А. С.* О процедурах классификации, основанных на построении покрытий классов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2003. — Т. 43, № 12. — С. 1910–1921.

[14] *Дюкова Е. В.* О числе тупиковых покрытий целочисленной матрицы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2003. — Т. 45, № 5. — С. 938–943.

[15] *Дюкова Е. В.* О построении тупиковых покрытий булевой матрицы // ДАН. — 2007. — Т. 412, № 1. — С. 15–17.

[16] *Демьянов Е. А., Дюкова Е. В.* О построении тупиковых покрытий целочисленной матрицы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2007. — Т. 47, № 3. — С. 539–547.

[17] *Андреев А. Е.* Об асимптотическом поведении числа тупиковых тестов и длины минимального теста для почти всех таблиц // Проблемы кибернетики. М: Наука.— 1984. — Вып. 41 — С. 117–142.

Об асимптотически эффективном поиске конъюнктивных закономерностей*

Дюкова Е. В., Нефёдов В. Ю.
edjukova@mail.ru
Москва, Вычислительный центр РАН

Получены новые результаты, касающиеся снижения вычислительной сложности логических процедур распознавания. Развиты асимптотические методы построения нормальных форм для характеристических функций классов. Усовершенствована методика эффективного поиска конъюнктивных закономерностей в случае неполных данных (наличия пропусков в признаковых описаниях объектов). Теоретические выводы подтверждены экспериментальными оценками.

About an asymptotically effective search for conjunctive rules*

Djukova E. V., Nefedov V. Y.
CCAS RAS, Moscow, Russia

New results are obtained in logical data analysis and in the development of recognition procedures based on constructing conjunctive rules. Asymptotic methods of constructing normal forms for characteristic functions of classes are developed. The technique of effective search is improved for in the case of incomplete data (when some values in the feature descriptions of objects are absent). Theoretical results are confirmed by experimental estimations.

Введение

Логический анализ целочисленных данных в распознавании базируется на методах построения нормальных форм двузначных логических функций, являющихся характеристическими функциями классов [1, 3–7, 10, 14, 17]. Характеристическая функция F_K класса K полностью определяется обучающей информацией и рассматриваемой моделью распознающего алгоритма. Если описания обучающих объектов являются полными (для каждого прецедента значение каждого признака задано), то возникает задача преобразования совершенной конъюнктивной нормальной формы (к. н. ф.) функции F_K в дизъюнктивную нормальную форму (д. н. ф.), т. е. задача перемножения логических скобок, каждая из которых содержит в точности n слагаемых, где n — число признаков. В случае неполных данных в некоторых скобках отсутствуют некоторые переменные, и исходная к. н. ф. не является совершенной. Построение искомой д. н. ф. приводит к построению множества конъюнктивных закономерностей класса K.

Поиск конъюнктивных закономерностей является трудной в вычислительном плане задачей. Особую сложность вызывает построение сокращённой д. н. ф. функции F_K (её длина, как правило, растёт экспоненциально с ростом размера исходной к. н. ф.).

Данная задача относится к числу труднорешаемых задач перечисления (порождения) решений. Эффективность алгоритмов для задач перечисления принято оценивать сложностью шага (временной задержкой шага). Главной задачей перечисления считается дуализация — задача построения сокращённой д. н. ф. монотонной булевой функции от n переменных, заданной к. н. ф. вида

$$D_1 \ \& \ \cdots \ \& \ D_u, \qquad (1)$$

где D_i, $i = 1, \ldots, u$, — элементарная дизъюнкция на переменными $x_1, \ldots, x_n$.

Поиск эффективных алгоритмов для задачи дуализации ведётся с середины прошлого века [15]. В [21] предложен инкрементальный квазиполиномиальный алгоритм. Число элементарных операций, выполняемых этим алгоритмом на каждом шаге, ограниченно квазиполиномом от u, n и числа найденных на предыдущих шагах максимальных конъюнкций. Под элементарной операцией понимается просмотр одного символа переменной в к. н. ф. Существование алгоритма, действующего с (квази)полиномиальной задержкой, зависящей только от u и n, пока не установлено.

В [3, 4] предложен подход, позволяющий эффективно решать рассматриваемую задачу преобразования нормальных форм не всегда, а почти всегда (для почти всех к. н. ф. вида (1) при $n \to \infty$). В данном случае алгоритму разрешено делать «лишние» шаги, но число таких шагов должно иметь «почти всегда» более низкий порядок роста, чем число всех шагов алгоритма. С этой целью было введено понятие асимптотически оптимального алгоритма, которое уточнялось в ряде последующих работ [5–7, 9, 18].

В дальнейшем понятие асимптотически оптимального алгоритма было распространено на случай двузначной логической функции F, определённой на k-ичных n-мерных наборах и за-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-01-00770.

данной к. н. ф. из u элементарных дизъюнкций [5, 6, 10, 12, 17].

К настоящему моменту построен ряд асимптотически оптимальных алгоритмов при условии, что $\log_d u \leqslant (1-\varepsilon)\log_d n,\ \varepsilon > 0$, где $d = 2$ в случае, когда F — монотонная булева функция, $d = k$ в случае, когда F задана совершенной к. н. ф., и $d = k/(k+1)$ в случае, когда F задана произвольной к. н. ф. В этих алгоритмах встречаются лишние шаги двух типов. Первый тип лишнего шага — построение конъюнкции, не являющейся максимальной, второй тип — построение конъюнкции, которая уже была построена ранее. Среди построенных алгоритмов есть алгоритмы с лишними шагами только одного из указанных типов и есть алгоритмы, в которых присутствуют лишние шаги обоих типов. Проведено экспериментальное сравнение построенных алгоритмов [12]. Наилучшие результаты показывают алгоритмы ОПТ и его модификации: алгоритмы ОПТ+ и ОПТ++, предназначенные соответственно для построения максимальных конъюнкций монотонной булевой функции и для построения максимальных конъюнкций двузначной логической функции, заданной совершенной к. н. ф.

Ниже введено понятие асимптотически эффективного алгоритма, которое предъявляет более слабые требования к числу лишних шагов алгоритма по сравнению с понятием асимптотически оптимального алгоритма.

Пусть $B(F)$ — множество всех максимальных конъюнкций функции F, $Q(F)$ — конечная последовательность элементарных конъюнкций, содержащая $B(F)$, $Q(F) = \{B_1, \ldots, B_t\}$. Предполагается, что некоторые конъюнкции в $Q(F)$ могут встречаться более одного раза.

Будем говорить, что алгоритм A строит $Q(F)$ с полиномиальной задержкой, если на шаге i строится конъюнкция B_i из $Q(F)$ и при этом выполняется не более $d(u,n)$ элементарных операций, где $d(u,n)$ ограничено сверху полиномом от u и n.

Пусть алгоритм A строит последовательность $Q(F)$ с *полиномиальной задержкой*, проверяя каждую построенную конъюнкцию из $Q(F)$ на принадлежность к $B(F)$ (такая проверка может быть осуществлена за полиномиальное время согласно приведённым ниже утверждениям 1 и 2). Число шагов алгоритма A , равное длине последовательности $Q(F)$, обозначим через $N_A(F)$.

Алгоритм A назовём *асимптотически эффективным*, если для почти всех к. н. ф. вида (1) при $n \to \infty$ отношение $N_A(F)/|B(F)|$ почти всегда асимптотически не превосходит $\log_d n$. Алгоритм A является *асимптотически оптимальным*, если $N_A(F)$ асимптотически равно $|B(F)|$.

В данной работе показано, что алгоритм ОПТ и его модификации ОПТ+ и ОПТ++ являются асимптотически эффективными при $n \leqslant u \leqslant k^{n^\beta},\ \beta < 1/2$. Заметим, что в случае $\log_d u \leqslant (1-\varepsilon)\log_d n,\ \varepsilon > 0$, алгоритмы ОПТ, ОПТ+ и ОПТ++ являются асимптотически оптимальными (это следует из работ [10, 17]).

Основные результаты

Пусть E_k^n — множество наборов вида $(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$, где $\sigma_i \in \{1, \ldots, k-1\},\ i \in \{1, \ldots, n\}$, и пусть функция F определена на множестве E_k^n и принимает значения 1 и 0 соответственно на подмножествах N_F и $N_{\neg F}$ множества E_k^n.

Введём следующее обозначение:

$$x^\sigma = \begin{cases} 1, & \text{если } x = \sigma; \\ 0, & \text{если } x \neq \sigma, \end{cases}$$

$x, \sigma \in \{0, \ldots, k-1\}$.

Элементарной конъюнкцией (ЭК) над переменными $x_1, \ldots, x_n$ назовём выражение вида $x_{j_1}^{\sigma_1} \cdot \ldots \cdot x_{j_r}^{\sigma_r}$, где $x_{j_i} \in \{x_1, \ldots, x_n\}$ при $i = 1, \ldots, r$ и $x_{j_q} \neq x_{j_t}$ при $q, t \in \{1, \ldots, r\},\ t \neq q$. ЭК принимает значение 1 тогда и только тогда, когда каждый её множитель равен 1. Число r называется рангом элементарной конъюнкции.

Элементарной дизъюнкцией (ЭД) над переменными $x_1, \ldots, x_n$ назовём выражение вида $x_{j_1}^{\sigma_1} \vee \cdots \vee x_{j_r}^{\sigma_r}$, где $x_{j_i} \in \{x_1, \ldots, x_n\}$ при $i = 1, \ldots, r$ и $x_{j_q} \neq x_{j_t}$ при $q, t \in \{1, \ldots, r\},\ t \neq q$.

Пусть N_B — интервал истинности ЭК B, F задана к. н. ф. R вида (1), $M(B,R)$ — число дизъюнкций в к. н. ф. R, не содержащих переменных из B.

ЭК B назовём *допустимой* для F, если $N_B \cap N_{\neg F} = \varnothing$. Если B — допустимая конъюнкция, то, очевидно, $M(B,R) = 0$.

ЭК B назовём *неприводимой* для F, если не существует допустимой ЭК B' такой, что $N_{B'} \supset N_B$ и $M(B',R) = M(B,R)$.

ЭК B назовём *максимальной* для F, если она одновременно является допустимой и неприводимой.

Обозначим через $D_C(F)$ сокращённую д. н. ф. функции F, т. е. д. н. ф., состоящую из всех максимальных конъюнкций функции F.

Рассмотрим задачу преобразования к. н. ф. R в $D_C(F)$. Нам потребуются приведённые ниже утверждения 1 и 2.

Утверждение 1. *ЭК B является допустимой для F тогда и только тогда, когда каждая из дизъюнкций D_i, $i = 1, \ldots, u$, содержит хотя бы один множитель из B.*

Утверждение 2. *ЭК $B = x_{j_1}^{\sigma_1} \cdot \ldots \cdot x_{j_r}^{\sigma_r}$ является неприводимой для F тогда и только тогда, когда в к. н. ф. R найдётся r дизъюнкций $D_{i_1}, \ldots, D_{i_r}$, содержащих в точности один множитель из B, и, если $r > 1,\ p, q \in \{i_1, \ldots, i_r\}, p \neq q$, то дизъюнкции D_p и D_q содержат разные множители из B.*

Утверждения 1 и 2 являются критериями соответственно допустимости и неприводимости ЭК функции, заданной к. н. ф.

Будем говорить, что ЭД X *охватывает* ЭД Y, если ЭД X представима в виде $(Y \vee Z)$, где либо $Z = 0$, либо Z — некоторая ЭД.

Приведём краткое описание алгоритма ОПТ++ построения $D_C(F)$. На первом этапе работы алгоритма из исходной КНФ удалим охватывающие дизъюнкции применением правил поглощения:

$$Y \ \& \ (Y \vee Z) = Y,$$

$$Y \ \& \ Y = Y,$$

где Y и Z — элементарные дизъюнкции. Процедура удаления охватывающих дизъюнкций заключается в последовательном просмотре дизъюнкций $D_1, \ldots, D_u$ и удалении очередной дизъюнкции, если она охватывает хотя бы одну дизъюнкцию, не удалённую к данному моменту. Заметим, что приведённые операции не меняют множество максимальных конъюнкций функции F. В дальнейшем будем считать, что КНФ R не содержит охватывающих дизъюнкций.

Обозначим через $S(F)$ множество всех неприводимых конъюнкций функции F, $B(F)$ — множество всех максимальных конъюнкций функции F.

Пусть $G \in S(F)$, $G = x_{p_1}^{\sigma_{p_1}} \cdot \ldots \cdot x_{p_r}^{\sigma_{p_r}}$. Будем предполагать, что $p_1 < \cdots < p_r$. Будем говорить, что переменная x_j^σ, $j > p_r$, совместима с G, если $G \cdot x_j^\sigma \in S(F)$. В противном случае будем говорить, что x_j^σ несовместима с G.

Обозначим через $R_0(G)$ к. н. ф., полученную из R удалением переменных x_p^σ, где $p < p_1$. Если в одной из дизъюнкций оказались вычеркнутыми все переменные, то назовём такую дизъюнкцию *пустой*. Если в $R_0(G)$ нет пустых дизъюнкций, то через $R'_0(G)$ обозначим к. н. ф., полученную из $R_0(G)$ удалением охватывающих дизъюнкций. При $r \geqslant 2$ через $R_t(G)$, $t \in \{1, \ldots, r-1\}$, обозначим к. н. ф., полученную из R удалением дизъюнкций, содержащих переменные из G, и удалением из оставшихся дизъюнкций переменных, несовместимых с G. Если в $R_t(G)$ нет пустых дизъюнкций, то через $R'_t(G)$ обозначим к. н. ф., полученную из $R_t(G)$ удалением охватывающих дизъюнкций.

Конъюнкцию $G = x_{p_1}^{\sigma_{p_1}} \cdot \ldots \cdot x_{p_r}^{\sigma_{p_r}}$, $G \in S(F)$, назовём *правильной* для F, если при $t \in \{0, \ldots, r-1\}$ к. н. ф. $R_t(G)$ не содержит пустых дизъюнкций, а к.н.ф. $R'_t(G)$ содержит переменные $x_{p_{t+1}}^{\sigma_{p_{t+1}}}, \ldots, x_{p_{t+1}}^{\sigma_{p_{t+1}}}$.

Пусть ЭК $G = x_{p_1}^{\sigma_{p_1}} \cdot \ldots \cdot x_{p_r}^{\sigma_{p_r}}$ — правильная. Назовём конъюнкцию G *тупиковой* для F, если для любых p и σ, $p_r < p \leqslant n$, $0 \leqslant \sigma \leqslant k-1$, конъюнкция $G \cdot x_p^\sigma$ не является правильной.

Обозначим через $W(F)$ множество всех тупиковых конъюнкций функции F. Описываемый алгоритм ОПТ++ строит множество $B(F)$, перебирая в определённом порядке конъюнкции из $W(F)$. На каждом шаге ОПТ++ строит одну конъюнкцию из $W(F)$, выполняя не более $O\big(kqun(u+q)\big)$ элементарных операций, где $q = \min(u, n)$.

Утверждение 3. *Если ЭК является максимальной для F, то она является тупиковой для F.*

Обратное утверждение неверно (тупиковая конъюнкция может не быть допустимой и, следовательно, максимальной).

Утверждение 4. *Сложность шага алгоритма ОПТ++ (т. е. число выполняемых на каждом шаге элементарных операций) не превосходит $O\big(kqun(u+q)\big)$, где $q = \min(u, n)$.*

Утверждение 5. *Если $n \leqslant u \leqslant k^{n^\beta}$, $\beta < 1/2$, $d = k/(k+1)$, то при $n \to \infty$ для почти всех к. н. ф. вида* (1) $\log_d |W(F)|$ *асимптотически равен* $\log_d |B(F)|$.

Из утверждений 3, 4, 5 и результатов, полученных в [20], следует

Теорема 6. *При $n \leqslant u \leqslant k^{n^\beta}$, $\beta < 1/2$, алгоритмы ОПТ, ОПТ+ и ОПТ++ являются асимптотически эффективным.*

Проведено тестирование алгоритма ОПТ++ на случайных данных. Получены экспериментальные оценки числа максимальных конъюнкций и числа «лишних» шагов алгоритма. Результаты счёта показали, что ОПТ++ работает быстрее и делает существенно меньше «лишних» шагов по сравнению с другими ранее разработанными асимптотически оптимальными алгоритмами. Доля «лишних» шагов алгоритма ОПТ++ возрастает с увеличением доли пропущенных значений признаков в обучающей выборке и уменьшается с ростом отношения u/n.

Выводы

Рассмотрена задача построения сокращённой д. н. ф. двузначной логической функции F, определённой на k-ичных n-мерных наборах и заданной к. н. ф. из u элементарных дизъюнкций. Для решения этой задачи построен асимптотически эффективный алгоритм ОПТ++. Обоснование эффективности этого алгоритма базируется на получении новых асимптотических оценок типичных значений числа максимальных конъюнкций и числа тупиковых конъюнкций функции F. Также проведено экспериментальное исследование построенного алгоритма. Показано, что по экспериментальным характеристикам эффективности алгоритм ОПТ++ превосходит другие аналогичные алгоритмы.

Литература

[1] *Баскакова Л. В., Журавлев Ю. И.* Модель распознающих алгоритмов с представительными набо-

рами и системами опорных множеств // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1981. — Т. 21, № 5. — С. 1264–1275.

[2] *Демьянов Е. А., Дюкова Е. В.* О построении тупиковых покрытий целочисленной матрицы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2007. — Т. 47, № 3. — С. 539–547.

[3] *Дюкова Е. В.* Об асимптотически оптимальном алгоритме построения тупиковых тестов // ДАН СССР. — 1977. — Т. 233, № 4. — С. 527–530.

[4] *Дюкова Е. В.* Асимптотически оптимальные тестовые алгоритмы в задачах распознавания // Пробл. кибернетики. М.: Наука. — 1982. — Вып. 39. — С. 165–199.

[5] *Дюкова Е. В.* О сложности реализации некоторых процедур распознавания // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1987. — Т. 27, № 1. — С. 114–127.

[6] *Дюкова Е. В.* Алгоритмы распознавания типа Кора: сложность реализации и метрические свойства // Распознавание, классификация, прогноз (матем. методы и их применение). М.: Наука. — 1989. — Вып. 2. — С. 99–125.

[7] *Дюкова Е. В.* О сложности реализации дискретных (логических) процедур распознавания // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2004. — Т. 44, № 3. — С. 550–572.

[8] *Дюкова Е. В.* О числе тупиковых покрытий целочисленной матрицы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2005. — Т. 45, № 5. — С. 935–940.

[9] *Дюкова Е. В.* О построении тупиковых покрытий булевой матрицы // ДАН СССР. — 2007. — Т. 412, № 1. — С. 15–17.

[10] *Дюкова Е. В., Журавлёв Ю. И.* Дискретный анализ признаковых описаний в задачах распознавания большой размерности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2000. — Т. 40, № 8. — С. 1264–1278.

[11] *Дюкова Е. В., Инякин А. С.* О процедурах классификации, основанных на построении покрытий классов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2003. — Т. 43, № 12. — С. 1910–1921.

[12] *Дюкова Е. В., Инякин А. С.* Об асимптотически оптимальном построении тупиковых покрытий целочисленной матрицы // Математические вопросы кибернетики. М.: Физматлит. — 2008. — Вып. 17. — С. 247–262.

[13] *Дюкова Е. В., Песков Н. В.* Поиск информативных фрагментов описаний объектов в дискретных процедурах распознавания // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2002. — Т. 42, № 5. — С. 741–753.

[14] *Журавлёв Ю. И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Пробл. кибернетики. М.: Наука. — 1978. — Вып. 33. — С. 5–68.

[15] *Чегис И. А., Яблонский С. В.* Логические способы контроля электрических схем // Труды Матем. ин-та им. В.А. Стеклова АН СССР. — 1958. — Т. 51. — С. 270–360.

[16] *Яблонский С. В.* Введение в дискретную математику. — М.: Наука, 1986.

[17] *Djukova E. V., Zhuravlev Yu. I.* Discrete Methods of Information Analysis in Recognition and Algorithm Synthesis // Pattern Recognition and Image Analysis. — 1997. — Vol. 7, No. 2. — Pp. 192–207.

[18] *Djukova E. V.* Discrete (Logical) Recognition Procedures: Principles of construction, Complexity of Realization and Basic Models // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2003. — Vol. 13, No. 3. — Pp. 417–425.

[19] *Djukova E. V., Nefedov V. Y.* On Complexity of Logical Data Analysis in Recognition Problems // 9-th International Conference “Pattern Recognition and Image Analysis: New Information Technologies” (PRIA-9-2008): Conference Proceedings, Vol. 1, Nizhni Novgorod: Диалог Культур, 2008. — Pp. 85–88.

[20] *Djukova E. V., Nefedov V. Y.* On the Complexity of Search for Conjunctive Rules in Recognition Problems // Proceedings of the Second International Conference “Classification, Forecasting, Data Mining”, Varna (Bulgaria), 2010.

[21] *Gurvich V., Khachiyan L.* On generating the irredundant conjunctive and disjunctive normal forms of monotone Boolean functions // Discrete Appl. Math. — 1999. — Vol. 96–97, No. 1–3. — Pp. 363–373.

[22] *Jonson D. S., Yannakakis M., Papadimitriou C. H.* On General All Maximal Independent Sets // Information processing Letters. — 1988. — Vol. 27. — Pp. 119–123.

Непрерывная коррекция информационного критерия Акаике для регуляризованного оценивания сверхбольшого числа параметров регрессионных моделей данных с неизвестной дисперсией наблюдения*

Ежова Е. О., Красоткина О. В., Моттль В. В.
lena-ezhova@rambler.ru, ko189177@yandex.ru, vmottl@yandex.ru
Долгопрудный Московской обл., МФТИ; Тула, ТулГУ, Москва, ВЦ РАН

Предлагается обобщение принципа максимума информации по Кульбаку, лежащего в основе классического информационного критерия Акаике, на более широкий класс моделей, в котором размерность вектора подлежащих оцениванию параметров фиксирована и многократно превосходит число доступных наблюдений, но свобода их выбора ограничена регуляризующей системой непрерывно вложенных семейств априорных плотностей распределения. Отказ от предположения, что логарифмическая функция правдоподобия является квадратичной по всем искомым параметрам, позволяет применить обобщенный критерий Акаике к задаче оценивания нестационарной линейной регрессионной модели временного ряда с неизвестной дисперсией шума наблюдения и неизвестной степенью изменчивости коэффициентов во времени.

A continuous correction of the Akaike Information Criterion for regularized estimating superdimensioned parameter vectors in regression data models with unknown observation variance*

Ezhova E. O., Krasotkina O. V., Mottl V. V.
Moscow Institute of Physics and Technology, Tula State University,
Computing Center of the Russian Academy of Sciences

The classical Akaike information criterion is extended onto a wider class of data models in which the dimensionality of the parameter vector to be estimated is fixed and hugely exceeds the number of available observations, but instead the freedom of its choice is restricted by a regularizing system of continuously nested families of a priori distribution densities. The waiver of the assumption that the logarithmic likelihood function is quadratic relative to all unknown parameters allows for application of the generalized criterion to the problem of estimating the linear regression model of a time series with both unknown variance of the observation noise and unknown time-volatility of regression coefficients.

Информационный критерий Акаике (AIC) [2] широко используется в современном анализе данных как простой и эффективный способ выбора наиболее адекватного класса модели из упорядоченного дискретного множества вложенных классов моделей. В его классическом изложении обычно рассматривается выборка $\mathbf{y} = (y_j, j = 1, \ldots, N)$ независимых случайных величин с неизвестной плотностью распределения $\varphi^*(y)$, которую наблюдатель желает оценить в параметрическом семействе $\varphi(y \mid \mathbf{c})$, $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$.

Если размерность вектора параметров m, оставаясь меньше размера обучающей выборки $m < N$, все же слишком велика и приближается к N, то становится некорректным применение принципа максимального правдоподобия:

$$\hat{\mathbf{c}}(\mathbf{y}) = \arg\max_{\mathbf{c}} \ln \Phi(\mathbf{y} \mid \mathbf{c}) = \arg\max_{\mathbf{c}} \sum_{j=1}^{N} \ln \varphi(y_j \mid \mathbf{c}).$$

Если же предположить, что элементы вектора $\mathbf{c}$ обладают естественной упорядоченностью по степени «важности», и при этом $c_i = 0$ при $m < i \leqslant n$, т. е.

$$\mathbf{c} = (\mathbf{c}_n, \mathbf{c}_{m-n}),\ \mathbf{c}_n \in \mathbb{R}^n,\ \mathbf{c}_{m-n} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{m-n},$$

то параметрическое семейство $\Phi(\mathbf{y} \mid \mathbf{c})$ будет представлено как последовательность вложенных классов моделей $\Phi\big(\mathbf{y} \mid (\mathbf{c}_n, \mathbf{0})\big)$, $\mathbb{R}^{n_{\min}} \subset \cdots \subset \mathbb{R}^{n_{\max}}$. Критерий AIC в классической постановке является способом оценивания подходящей размерности вектора параметров как меры сложности модели:

$$\hat{n} = \arg\max_{n} \big\{ \ln \Phi\left(\mathbf{y} \mid \big(\hat{\mathbf{c}}_n(\mathbf{y}), \mathbf{0}\big)\right) - n \big\}. \qquad (1)$$

В основе классического AIC лежит идея скрытой перекрестной проверки, т. е. максимизации математического ожидания информации по Кульбаку о неизвестном значении параметра $(\mathbf{c}^*_{n^*}, \mathbf{0})$, вырезанного из «истинного» вектора $\mathbf{c}^* = (c^*_1, \ldots, c^*_m)$, содержащейся в оценке этого параметра $\big(\hat{\mathbf{c}}_n(\tilde{\mathbf{y}}), \mathbf{0}\big)$ по воображаемой независимой случайной выборке $\tilde{\mathbf{y}}$:

$$\hat{n} = \arg\max_{n} \int \Big\{ \int \big[\ln \Phi\big(\mathbf{y} \mid (\hat{\mathbf{c}}_n(\tilde{\mathbf{y}}), \mathbf{0})\big) \big] \times \Phi\big(\tilde{\mathbf{y}} \mid (\mathbf{c}^*_{n^*}, \mathbf{0})\big) d\tilde{\mathbf{y}} \Big\} \Phi\big(\mathbf{y} \mid (\mathbf{c}^*_{n^*}, \mathbf{0})\big) d\mathbf{y}. \qquad (2)$$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-01-12085-офи-м.

Со времен публикации первой статьи Акаике было предложено много модификаций этого критерия [3]. Однако все они были нацелены на выбор размерности вектора параметров для случая известной упорядоченности его элементов по степени «важности».

В работах [1] было предложено новое обобщение критерия Акаике, вызванное необходимостью анализа нестационарного сигнала $(\mathbf{y}\in\mathbb{R}^N, \mathbf{x}\in\mathbb{R}^{kN}) = = \big((y_t\in\mathbb{R},\ \mathbf{x}_t\in\mathbb{R}^k),\ t=1,\ldots,N\big)$, регрессионная модель которого изменяется во времени:

$$\begin{aligned} y_t &= \mathbf{c}_t^{\intercal}\mathbf{x}_t+\eta_t, \quad \mathbf{c}_t,\mathbf{x}_t\in\mathbb{R}^k,\\ \eta_t &\sim \mathcal{N}(\eta_t\,|\,0,\delta), \quad E(\eta_t\eta_s)=0. \end{aligned} \tag{3}$$

Условная нормальная плотность распределения сигнала $\mathbf{y}=(y_1,\ldots,y_N)$ относительно последовательности регрессоров $\mathbf{x}=(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N)$ и коэффициентов регрессии $\mathbf{c}=(\mathbf{c}_1,\ldots,\mathbf{c}_N)$ определяется как

$$\Phi(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\,\mathbf{c},\,\delta)\propto\exp\big(\tfrac{1}{2\delta}\|\mathbf{y}-\mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{c}\|^2\big), \tag{4}$$

где $\mathbf{X}=(\mathbf{X}_{ts},\ t,s=1,\ldots,N)$ — блочно-диагональная матрица общей размерности $(kN\times N)$ с диагональными блоками-столбцами $\big(\mathbf{X}_{tt}=\mathbf{x}_t\ \ (k\times 1),\ t=1,\ldots,N\big)$ и нулевыми недиагональными блоками $\mathbf{X}_{ts}=\mathbf{0}\ \ (k\times 1),\ t\neq s$.

Очевидно, что размерность вектора параметров в семействе условных плотностей распределения оказывается фиксированной $\mathbf{c}\in\mathbb{R}^{kN}$ и в k раз превосходит количество наблюдений N. Последнее обстоятельство делает бессмысленной оценку максимального правдоподобия.

Вместо этого предполагается, что искомая последовательность коэффициентов представляет собой случайный марковский процесс

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_t &= \mathbf{V}_t\mathbf{c}_{t-1}+\xi_t,\\ \xi_t &\sim \mathcal{N}\left(\xi\,|\,\mathbf{0},\lambda\delta\mathbf{I}\right), \quad E\left(\xi_t\xi_s^{\intercal}\right)=\mathbf{0}, \end{aligned} \tag{5}$$

который начинается с неизвестного первого значения $\mathbf{c}_1\sim\mathcal{N}(\mathbf{c}_1\,|\,\mathbf{0},\rho\mathbf{I})$, $\rho\to\infty$. Здесь заданная последовательность матриц $\mathbf{V}_t$ определяет априорную динамику неизвестных коэффициентов регрессии в виде несобственной нормальной плотности

$$\Psi(\mathbf{c}\,|\,\lambda\delta)\propto\exp\big(-\tfrac{1}{2\lambda\delta}\mathbf{c}^{\intercal}\mathbf{B}\mathbf{c}\big), \tag{6}$$

где $\mathbf{B}$ — блочно-трехдиагональная матрица с квадратными блоками $k\times k$, образуемая главной диагональю $(\mathbf{V}_2^{\intercal}\mathbf{V}_2,\quad \mathbf{V}_3^{\intercal}\mathbf{V}_3+\mathbf{I},\ \ldots,\ \mathbf{V}_N^{\intercal}\mathbf{V}_N+\mathbf{I},\quad \mathbf{I})$, а также симметричными над- и под-диагоналями $(-\mathbf{V}_2^{\intercal},-\mathbf{V}_3^{\intercal},\ldots,-\mathbf{V}_N^{\intercal})$, $(-\mathbf{V}_2,-\mathbf{V}_3,\ldots,-\mathbf{V}_N)$.

Отношение λ дисперсии шума в марковской модели последовательности векторных коэффициентов нестационарной регрессии $\lambda\delta$ (5) и дисперсии аддитивного шума в модели наблюдения δ (3) является структурным параметром априорной модели, ределяющим предполагаемую степень ее нестационарности. Байесовская оценка последовательности коэффициентов нестационарной регрессии определяется выражением [1]

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{c}}_\lambda(\mathbf{y}) &= \arg\max_{\mathbf{c}}\big[\ln\Phi(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{c},\delta)+\ln\Psi(\mathbf{c}\,|\,\lambda\delta)\big] = \\ &= \arg\min_{\mathbf{c}}\big[\|\mathbf{y}-\mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{c}\|^2+\tfrac{1}{\lambda}\mathbf{c}^{\intercal}\mathbf{B}\mathbf{c}\big] = \\ &= \big(\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}+\tfrac{1}{\lambda}\mathbf{B}\big)^{-1}\mathbf{X}\mathbf{y}. \end{aligned} \tag{7}$$

Это типичный пример задачи, в которой плавное изменение параметра нестационарности λ определяет систему непрерывно вложенных несобственных априорных плотностей распределения $\Psi(\mathbf{c}\,|\,\lambda\delta)$ вектора параметров модели, начиная от «равномерного» распределения в $\mathbb{R}^k$ при $\lambda=0$ до «равномерного» распределения в $\mathbb{R}^{kN}$ при $\lambda\to\infty$.

Задача выбора параметра λ рассмотрена в [1] для частного случая модели нестационарной регрессии, когда дисперсия шума наблюдения δ известна, и, следовательно, условная плотность распределения наблюдений $\Phi(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\mathbf{c},\delta)$ полностью определяется последовательностью коэффициентов нестационарной регрессии $\mathbf{c}=(\mathbf{c}_1,\ldots,\mathbf{c}_N)$. Показано, что непрерывным обобщением информационного критерия Акаике (1) является критерий

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}(\mathbf{y},\delta) = \arg\max_{\lambda}\Big\{&\ln\Phi\big(\mathbf{y}\,|\,\hat{\mathbf{c}}_\lambda(\mathbf{y}),\delta\big)-\\ &-\operatorname{tr}\big[\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}\big(\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}+\tfrac{1}{\lambda}\mathbf{B}\big)^{-1}\big]\Big\}, \end{aligned} \tag{8}$$

или, в эквивалентной форме,

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}(\mathbf{y},\delta) = \arg\min_{\lambda}\Big\{&\tfrac{N}{2}\ln\delta+\tfrac{1}{2\delta}\|\mathbf{y}-\mathbf{X}^{\intercal}\mathbf{c}\|^2+\\ &+\operatorname{tr}\big[\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}\big(\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}+\tfrac{1}{\lambda}\mathbf{B}\big)^{-1}\big]\Big\}. \end{aligned} \tag{9}$$

Сравнение критериев (8) и (1) позволяет интерпретировать $\operatorname{tr}\big[\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}\big(\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}+\tfrac{1}{\lambda}\mathbf{B}\big)^{-1}\big]$ — штрафной член в (8) — как «эффективную размерность» параметра $\mathbf{c}$, возможные значения которого ограничены априорным распределением $\Psi(\mathbf{c}\,|\,\lambda\delta)$ [1]:

$$\lim\operatorname{tr}\big[\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}\big(\mathbf{X}\mathbf{X}^{\intercal}+\tfrac{1}{\lambda}\mathbf{B}\big)^{-1}\big]=\begin{cases}k, & \lambda\to 0,\\ N, & \lambda\to\infty.\end{cases}$$

Хотя штрафной член зависит лишь от отношения λ дисперсий шума в априорной модели $\lambda\delta$ и в модели наблюдения δ, последняя дисперсия непосредственно влияет на значения логарифмической функции правдоподобия $\Phi(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\mathbf{c},\delta)$. Как следствие, экстремальное значение параметра нестационарности (8,9) существенно зависит от принятого значения δ, которое в [1] считалось известным, что неприемлемо в реальной ситуации.

В данной работе рассматривается коррекция непрерывного критерия Акаике, позволяющая оценивать дисперсию шума наблюдения непосредственно в процессе обработки временного ряда.

Принцип максимума информации о случайном сигнале, содержащейся в его единственной реализации

Будем полагать, что «природа» генерирует скрытую последовательность коэффициентов регрессии $\mathbf{c} = (\mathbf{c}_t,\ t = 1,\dots,N) \in \mathbb{R}^{kN}$ в соответствии с параметрическим семейством плотностей распределения $\Psi^*(\mathbf{c}\,|\,\delta)$. Будем также полагать, что наблюдаемый временной ряд $(\mathbf{y},\mathbf{x}) = \big((y_t,\mathbf{x}_t),\ t = 1,\dots,N\big)$ генерируется «природой» согласно условной плотности распределения $\Phi(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\mathbf{c},\delta)$ из предполагаемого наблюдателю параметрического семейства с дисперсией шума наблюдения δ. Тогда неизвестная условная плотность, определяющая случайное соотношение компонент временного ряда, выражается как непрерывная смесь

$$F^*(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\delta) = \int \Phi(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\mathbf{c},\delta)\Psi^*(\mathbf{c}\,|\,\delta)d\mathbf{c}. \qquad (10)$$

Пусть наблюдатель, не имея сведений об «истинном» семействе распределений $\Psi^*(\mathbf{c}\,|\,\delta)$, использует для его аппроксимации параметрической семейство $\Psi(\mathbf{c}\,|\,\lambda\delta)$ (6), стремясь подобрать подходящее значение коэффициента λ, связывающего параметр этого модельного распределения с неизвестной дисперсией шума наблюдения δ в $\Phi(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\mathbf{c},\delta)$ (4) и определяющего степень изменчивости во времени оценки последовательности коэффициентов нестационарной регрессии (7).

Временной ряд $\mathbf{y}$, зарегистрированный наблюдателем, является реализацией случайного процесса (10). Введем в рассмотрение еще две воображаемые независимые реализации $\tilde{\mathbf{y}}$ и $\tilde{\tilde{\mathbf{y}}}$. Аналогично классическому принципу AIC (2), естественно стремиться выбрать такое значение структурного параметра λ, чтобы последовательно полученные по ним байесовская оценка скрытой последовательности коэффициентов регрессии $\hat{\mathbf{c}}_\lambda(\tilde{\mathbf{y}})$ (7) и оценка дисперсии шума наблюдения

$$\hat{\delta}_\lambda(\tilde{\tilde{\mathbf{y}}}) = \tfrac{1}{N}\big\|\tilde{\tilde{\mathbf{y}}} - \mathbf{X}^\intercal\hat{\mathbf{c}}_\lambda(\tilde{\tilde{\mathbf{y}}})\big\|^2,$$

являющиеся случайными величинами, определяли случайное распределение вероятности $\big[\Phi\big(\mathbf{y}\,|\,\hat{\mathbf{c}}_\lambda(\tilde{\mathbf{y}}),\ \hat{\delta}_\lambda(\tilde{\tilde{\mathbf{y}}})\big),\ \ \mathbf{y}\in\mathbb{R}^N\big]$, в среднем наиболее близкое по Кульбаку к «правильному» распределению (10):

$$\hat{\lambda} = \arg\max_\lambda \int\Big\{\int\Big\{\int\Big\{\int\big[\ln\Phi\big(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\hat{\mathbf{c}}_\lambda(\tilde{\mathbf{y}}),\hat{\delta}_\lambda(\tilde{\tilde{\mathbf{y}}})\big)\big]\times$$
$$\times\,\Phi(\tilde{\tilde{\mathbf{y}}}\,|\,\mathbf{x},\mathbf{c},\delta)\,d\tilde{\tilde{\mathbf{y}}}\Big\}\Phi(\tilde{\mathbf{y}}\,|\,\mathbf{x},\mathbf{c},\delta)\,d\tilde{\mathbf{y}}\Big\}\Phi(\mathbf{y}\,|\,\mathbf{x},\mathbf{c},\delta)\,d\mathbf{y}\Big\}\times$$
$$\times\,\Psi^*(\mathbf{c}\,|\,\delta)\,d\mathbf{c}. \qquad (11)$$

Можно показать, что предположение (11) приводит к следующему критерию для оценивания значения структурного параметра:

$$\hat{\lambda}_{\mathrm{AIC}}(\mathbf{y}) = \arg\min_\lambda \tfrac{N}{2}\ln\hat{\delta}_\lambda(\mathbf{y}) + \tfrac{1}{\hat{\delta}_\lambda(\mathbf{y})}\operatorname{tr}\big[\mathbf{X}\mathbf{X}^\intercal\big(\mathbf{X}\mathbf{X}^\intercal + \tfrac{1}{\lambda}\mathbf{B}\big)\big], \qquad (12)$$

где

$$\hat{\delta}_\lambda(\mathbf{y}) = \tfrac{1}{N}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}^\intercal\hat{\mathbf{c}}_\lambda(\mathbf{y})\|^2 = \tfrac{1}{N}\mathbf{y}^\intercal\big[\mathbf{I} - \mathbf{X}^\intercal\big(\mathbf{X}\mathbf{X}^\intercal + \tfrac{1}{\lambda}\mathbf{B}\big)^{-1}\mathbf{X}\big]^2\mathbf{y}. \qquad (13)$$

Его сравнение с (9) показывает, что дополнительное оценивание дисперсии шума наблюдения согласно (13)

$$\hat{\delta}_\lambda(\mathbf{y}) = \arg\min_\delta\Big\{\tfrac{N}{2}\ln\delta + \tfrac{1}{2\delta}\|\mathbf{y} - \mathbf{X}^\intercal\hat{\mathbf{c}}_\lambda(\mathbf{y})\|^2\Big\}$$

по тому же временному ряду, который уже использован для оценивания последовательности коэффициентов нестационарной регрессии $\hat{\mathbf{c}}_\lambda(\mathbf{y})$, привело к ужесточению штрафа на увеличение параметра нестационарности λ в виде дополнительного коэффициента $1/\hat{\delta}_\lambda(\mathbf{y})$ при исходном штрафе $\operatorname{tr}\big[\mathbf{X}\mathbf{X}^\intercal\big(\mathbf{X}\mathbf{X}^\intercal + \frac{1}{\lambda}\mathbf{B}\big)\big]$. Очевидно, что штраф бесконечно возрастает при $\lambda\to\infty$, поскольку при этом $\hat{\delta}_\lambda(\mathbf{y})\to 0$.

Модельные эксперименты

Модельные эксперименты дают возможность придать абсолютный смысл понятию «подходящего» значения параметра нестационарности $\hat{\lambda}$ в модели нестационарной регрессии. Качество конкретной процедуры анализа временного ряда естественно оценивать по относительному отклонению восстановленной последовательности коэффициентов регрессии $\hat{\mathbf{c}}_{\hat{\lambda}}(\mathbf{y}) = \big(\hat{\mathbf{c}}_{t,\hat{\lambda}}(\mathbf{y}),\ t = 1,\dots,N\big)$ от истинной последовательности $\mathbf{c}^* = (\mathbf{c}^*_t,\ t = 1,\dots,N)$, в точности известной в модельных данных:

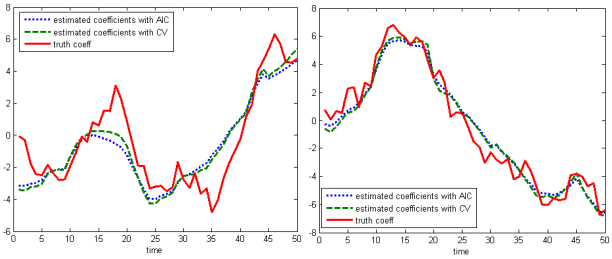
$$Q(\hat{\lambda}) = \sum_{t=1}^N\|\hat{\mathbf{c}}_{t,\hat{\lambda}}(\mathbf{y}) - \mathbf{c}^*_t\|^2\ \Big/\ \sum_{t=1}^N\|\mathbf{c}^*_t\|^2. \qquad (14)$$

Целью экспериментов являлось испытание предложенного здесь непрерывного обобщения информационного критерия Акаике как альтернативы методу скользящего контроля [1].

В основе массива 200 модельных временных рядов $(\mathbf{y},\mathbf{x}) = \big((y_t\in\mathbb{R},\ \mathbf{x}_t\in\mathbb{R}^3),\ t = 1,\dots,N\big)$ длины $N = 50$ с одной и той же последовательностью регрессоров $\mathbf{x}$, полученной как совокупность независимых случайных векторов $\mathbf{x}_t$ с независимыми нормальными компонентами $\mathcal{N}(x^i_t\,|\,0,1)$, $i = 1,2,3$. Скалярные компоненты временных рядов $\mathbf{y}$ образованы согласно (3) из 200 независимых реализаций

марковской случайной последовательности коэффициентов регрессии (5) с дисперсией шума в модели состояния $\lambda\delta = 1$. В каждой реализации дисперсия шума наблюдения в (3) была выбрана индивидуально из условия $\delta = \frac{0{,}1}{N}\sum_{t=1}^{N}(\mathbf{x}_t^{\mathsf{T}}\mathbf{c}_t)^2$.

Для каждого из 200 временных рядов были выбраны значения параметра нестационарности $\hat{\lambda}_{\mathrm{AIC}}(\mathbf{y})$ по критерию (12) и $\hat{\lambda}_{\mathrm{CV}}(\mathbf{y})$ по критерию скользящего контроля, а также вычислены соответствующие оценки последовательностей коэффициентов регрессии для обоих значений параметра нестационарности $\hat{\mathbf{c}}_{\hat{\lambda}_{\mathrm{AIC}}}(\mathbf{y})$ и $\hat{\mathbf{c}}_{\hat{\lambda}_{\mathrm{CV}}}(\mathbf{y})$ (рис. 1).



$\hat{\lambda}_{\mathrm{AIC}}(\mathbf{y}) = 0,26 \qquad \hat{\lambda}_{\mathrm{CV}}(\mathbf{y}) = 0,57$

Рис. 1. Пример восстановленной динамики двух первых коэффициентов регрессии $(\hat{c}_1^i, \ldots, \hat{c}_N^i)$, $i = 1, 2$ в сравнении с истинной динамикой для одного из рядов.

Оказалось, что средняя ошибка оценивания коэффициентов нестационарной регрессии (14) по всем временным рядам для критерия Акаике $Q(\hat{\lambda}_{\mathrm{AIC}}) = 0{,}21$ мало отличается от ошибки для критерия скользящего контроля $Q(\hat{\lambda}_{\mathrm{CV}}) = 0{,}19$.

Оценивание скрытого состава инвестиционного портфеля

Мы применили динамическую регрессионную модель скрытого долевого состава инвестиционного портфеля [4] к опубликованным временным рядам периодических доходностей инвестиционной компании Laudus Rosenberg Value Long/Short Fund $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_N)$ в течении $N = 60$ месяцев в интервале с января 2001 года по декабрь 2005 года вместе с известными по биржевым сводкам временными рядами индексов доходностей 10 основных секторов экономики $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)$, $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^{10}$. Долевой состав портфеля относительно этих индексов $\mathbf{c} = (\mathbf{c}_1, \ldots, \mathbf{c}_N)$, $\mathbf{c}_t \in \mathbb{R}^{10}$, оценивался как последовательность коэффициентов нестационарной регрессии. В такой модели параметр нестационарности λ имеет смысл неизвестной волатильности состава портфеля во времени.

Временные ряды восстановленного долевого состава портфеля с коэффициентом волатильности, выбранным по непрерывному критерию Акаике $\hat{\lambda}_{\mathrm{AIC}} = 0{,}00058$ и по скользящему контролю $\hat{\lambda}_{\mathrm{CV}} = 0{,}00033$ (рис. 2), показывают, что критерии дают весьма близкие результаты.

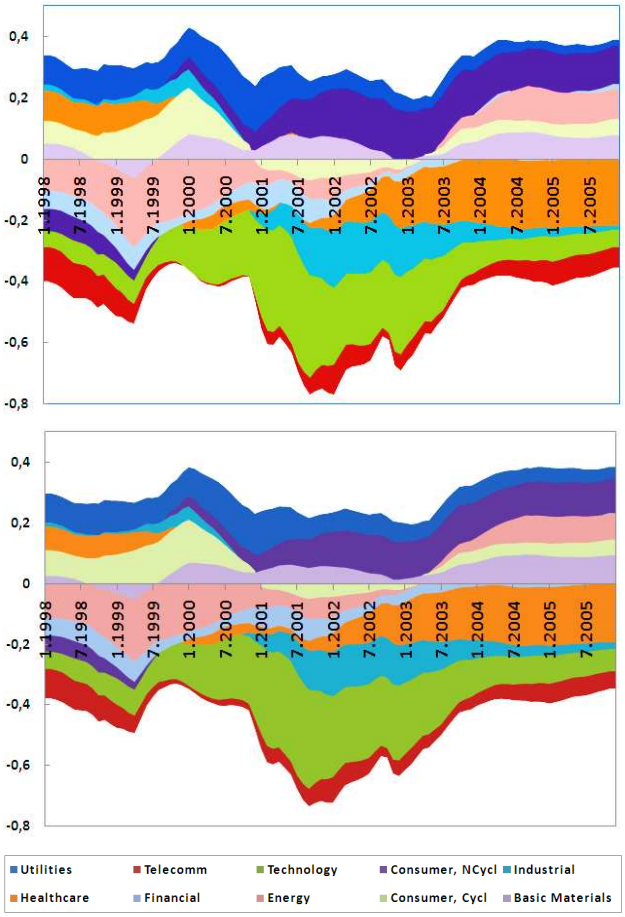


Рис. 2. Стековые диаграммы оцененной динамики долевого состава портфеля Laudus Rosenberg по критерию Акаике (верхняя) и по скользящему контролю (нижняя диаграмма). Отрицательные значения долей соответствуют заемным (так называемым коротким) позициям.

Литература

[1] *Ezhova E., Mottl V., Krasotkina O.* Estimation of time-varying linear regression with unknown time-volatility via continuous generalization of the Akaike Information Criterion. // International Journal of Mathematical and Statistical Sciences. — 2009 — Vol. 1, No. 2. — Pp. 82–87.

[2] *Akaike H.* A new look at the statistical model identification. IEEE Trans. on Automatic Control. — Vol. IC-19, No. 6, December 1974. — Pp. 716–723.

[3] *Rodrigues C. C.* The ABC of model selection: AIC, BIC and new CIC. AIP Conference Proceedings. — 2005. — Vol. 803, November 23. — Pp. 80–87.

[4] *Markov M., Muchnik I., Mottl V., Krasotkina O.* Dynamic analysis of hedge funds // Proceedings of the 3rd IASTED Internation Conference on Financal Engineering and Applications, Cambridge, Massachusetts, USA, October 9-11, 2006.

О логических алгоритмах распознавания*

Журавлёв Ю. И.
zhur@ccas.ru
Москва, Вычислительный центр РАН

Рассматривается новый класс логических алгоритмов распознавания. В них существенно используются конъюнкции, реализуемые более, чем в одном классе.

On logical algorithms of pattern recognition*

Zhuravlev Yu. I.
Moscow, Computing Center RAS

A new class of logical algorithms of pattern recognition is considered. In this class, conjunctions covering objects of more than one class are effectively used.

В научной литературе описано большое число алгоритмов, решающих задачу распознавания для исходной информации, заданной перечислением конечного числа объектов для каждого из классов. При этом объекты задаются набором значений фиксированного конечного числа дискретных признаков. Если признаки бинарные (принимают значения 0, 1), то базовыми элементами для построения распознающих алгоритмов являются элементарные конъюнкции, т. е. формулы вида

$$K = x_{i_1}^{\sigma_1} x_{i_2}^{\sigma_2} \dots x_{i_k}^{\sigma_k}, \quad x^\sigma = \begin{cases} x, & \sigma = 1; \\ \bar{x}, & \sigma = 0, \end{cases} \quad k \leqslant n,$$

n — число бинарных признаков.

В простейшем случае в задачах для двух непересекающихся классов с бинарными признаками в [1] было показано, что в алгебраическом замыкании степени не выше 3 над алгоритмами, базирующимися на элементарных конъюнкциях, в случае скользящего контроля существует (и построен) оптимальный по точности распознающий алгоритм. Но при этом разрешается использовать только K, принимающие значение 1 только на элементах одного из классов и на наборах, не входящих в таблицу обучения. Это условие широко используется при построении логических алгоритмов, например во всех широко применяемых модификациях (их описано большое число) алгоритмов «Тест» и «Кора».

Базовые конъюнкции при построении оптимальных по скользящему контролю алгоритмов конструируются следующим образом. Пусть $\tilde{\alpha}_i = (\alpha_{i_1} \dots \alpha_{i_n}) \in K_1$, $i = 1, \dots, u$. Для любой $\tilde{\alpha}_j \in K_1$, $\tilde{\alpha}_j = (\alpha_{j_1} \dots \alpha_{j_n})$, конструируются конъюнкции

$$K_j(\tilde{\alpha}_i, \tilde{\alpha}_j) = x_{t_1}^{\alpha_{i_{t_1}}} \dots x_{t_q}^{\alpha_{i_{t_q}}}, \quad j = 1, \dots, i-1, i+1, \dots, n.$$

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №08-01-00636, №10-01-90015 Бел-а) и программы фундаментальных исследований П-14 Президиума РАН.

Объект $\tilde{\alpha}_i$ в оптимальном по точности алгоритме скользящего контроля (см. выше) будет правильно распознан в том и только том случае, когда хотя бы один из интервалов N_j, $j \in \{1, \dots, i-1, i+1, \dots, n\}$, определяемых конъюнкцией $K_j(\tilde{\alpha}_i, \tilde{\alpha}_j)$, не содержит точек (наборов признаков), входящих в таблицу обучения и принадлежащих классу K_2. Заметим, что определение легко обобщается на случай задач с числом непересекающихся классов, больших 2.

Конъюнкции $K_j(\tilde{\alpha}_i, \tilde{\alpha}_j)$ в дальнейшем называются базовыми для объекта $\tilde{\alpha}_i$.

В настоящей работе рассматриваются алгоритмы, основанные на использовании конъюнкций (соответствующих интервалов), пересекающихся с объектами различных непересекающихся классов в таблице обучения. Здесь изучаются только задачи с двумя непересекающимися классами K_1, K_2, объекты задаются наборами фиксированных бинарных признаков $1, \dots, n$.

Результаты без труда обобщаются на случай любого конечного числа непересекающихся классов. Возможны также обобщения на случай признаков, принимающих конечное число значений $0, 1, \dots, k-1$. При этом приходится учитывать, что для функций k-значной логики понятие элементарной конъюнкции не однозначно. Для различных определений возникают различные (иногда существенно различающиеся) теоретические результаты и методы синтеза распознающих алгоритмов.

В дальнейшем предполагается, что объекты обучающей выборки из K_1 суть $\tilde{\alpha}_1, \dots, \tilde{\alpha}_u$, из K_2 — $\tilde{\beta}_1, \dots, \tilde{\beta}_v$. Используются интервалы, проходящие через одну из точек $\tilde{\alpha}_i$ и имеющие в качестве противоположной — точку из K_1 или из области неопределенности. Аналогично строятся интервалы для K_2.

Вводится система правил отсева интервалов. Так, интервал исключается, если в нем содержатся

базовые интервалы для точек одного (но не обоих) классов.

Так как в большинстве случаев множество $E^n \setminus (\tilde{K}_1 \cup \tilde{K}_2)$ велико ($\tilde{K}_1$, $\tilde{K}_2$ — множества из таблицы обучения), то вводятся ограничивающие параметры. Примеры таких параметров: число точек из K_2 в интервале конъюнкции для K_1; расстояние от K_1 до противоположной точки из области неопределенности для $\tilde{\alpha}_i$ из K_1 (могут рассматриваться среднее удаление от K_1 или расстояние до ближайшего эталона из K_1).

Вводятся параметры $w_1, \ldots, w_u$, $w^1, \ldots, w^v$ для эталонов из K_1, соответственно K_2, веса конъюнкций Q: $W_1(Q)$ для K_1 и $W_2(Q)$ для K_2, равные соответственно сумме весов объектов, входящих в интервал N_Q. Используются стандартные процедуры вычисления весов $W_1(Q)$, $W_2(Q)$ для отобранных конъюнкций и стандартные процедуры голосования.

Проведенные эксперименты показали, что точность при скользящем контроле и на независимой контрольной выборке во многих случаях выше, чем при использовании только конъюнкций, интервалы которых пересекаются с объектами только одного класса.

Литература

[1] *Журавлев Ю. И.* Об алгоритмах распознавания с представительными наборами (логических алгоритмах) // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2002. — Т. 42, № 9. — С. 1425–1433.

О вероятности переобучения пороговых конъюнкций*

Ивахненко А. А.
andrej_iv@mail.ru
Москва, Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН

Получены и исследованы комбинаторные оценки вероятности переобучения для логических правил, имеющих вид конъюнкций пороговых термов над заданным подмножеством вещественных признаков.

On the probability of overfitting for thresholded conjunction rules*

Ivahnenko A. A.
Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russia

Combinatorial bounds on probability of overfitting are obtained for thresholded conjunction rules learned from a fixed subset of real-valued features.

Проблема переобучения при индукции логических правил

Пусть задана выборка объектов $\mathbb{X} = (x_i)_{i=1}^L$, описанных n действительными признаками, $x_i = (x_i^1, \ldots, x_i^n)$, и каждому объекту x_i соответствует ответ y_i из заданного конечного множества Y.

Будем рассматривать алгоритмы классификации $a\colon \mathbb{R}^n \to Y$, основанные на взвешенном голосовании логических правил (rules):

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \sum_{r \in R_y} w_r r(x),$$

где w_r — вес правила r, обычно неотрицательный, R_y — множество правил класса y. В общем случае *правило* — это функция вида $r\colon \mathbb{R}^n \to \{0, 1\}$ из некоторого фиксированного параметрического семейства R. В данной работе рассматривается один из наиболее распространённых типов правил — семейство конъюнкций пороговых предикатов:

$$r(x) \equiv r(x; c^1, \ldots, c^n) = \prod_{j \in \omega} \left[x^j \lessgtr_j c^j\right], \qquad (1)$$

где $x = (x^1, \ldots, x^n) \in \mathbb{R}^n$, $\omega \subseteq \{1, \ldots, n\}$ — подмножество признаков, $\lessgtr_j$ — одна из операций сравнения $\{\leqslant, \geqslant\}$, c^j — порог по j-му признаку.

Говорят, что правило r *выделяет* объект x, если $r(x) = 1$. Предполагается, что правила класса y должны выделять как можно больше объектов класса y и как можно меньше объектов всех остальных классов. Поэтому для поиска (*индукции*) правил класса y по обучающей выборке $X \subset \mathbb{X}$ решается задача двухкритериальной оптимизации:

$$P(r, X) = \sum_{x_i \in X} r(x_i)\,[y_i = y] \to \max_r;$$
$$N(r, X) = \sum_{x_i \in X} r(x_i)\,[y_i \neq y] \to \min_r;$$

Работа поддержана РФФИ (проект №08-07-00422) и программой ОМН РАН «Алгебраические и комбинаторные методы математической кибернетики и информационные системы нового поколения».

На практике для этого оптимизируют некоторый критерий информативности, который является функцией от пары исходных критериев (P, N). В частности, это может быть энтропийный критерий, индекс Джини, точный тест Фишера, тест χ^2, тест ω^2 и другие [4], однако ни один из них не является безусловно предпочтительным. Большинство критериев оценивают степень неслучайности разбиения обучающей выборки X на два подмножества (положительные примеры $x\colon r(x) = 1$ и отрицательные $x\colon r(x) = 0$) относительно исходного разбиения выборки X на классы.

Недостаток стандартных критериев информативности в том, что они не учитывают переобучение. При оптимизации $P(r, X)$ и $N(r, X)$ по обучающей выборке X соответствующие величины $P' = P(r, \bar{X})$ и $N' = N(r, \bar{X})$ уже не будут оптимальны на контрольной выборке $\bar{X} = \mathbb{X} \backslash X$. Оценки [2, 5], основанные на теории Вапника-Червоненкиса [1], связывают вероятность переобучения со сложностью семейства правил R. Они зависят от ранга конъюнкции $|\omega|$ и числа допустимых значений признаков x^j по каждой размерности $j \in \omega$, но не зависят от конкретной выборки данных $\mathbb{X}$. Согласно экспериментам [5] эти оценки сильно завышены, что делает их непригодными для количественного предсказания значений (P', N').

Точные комбинаторные оценки вероятности переобучения [6, 7] позволяют учитывать свойства расслоения и связности — более тонкие характеристики семейства, зависящие от данных $\mathbb{X}$. До сих пор точные оценки удавалось получать лишь для некоторых модельных семейств алгоритмов: монотонных и унимодальных цепочек и многомерных сеток, интервалов и шаров булева куба, и т. п.

В данной работе предлагается оценка для семейства правил (1), используемого при решении практических задач [3]. Цель работы — получить критерий информативности набора признаков ω, который учитывал бы величину переобучения, возникающего при оптимизации порогов c^j, $j \in \omega$.

Вероятность переобучения правил

Произвольное правило $r \in R$ класса $y \in Y$ индуцирует на выборке $\mathbb{X}$ бинарный вектор ошибок $\boldsymbol{r} = (r_i)_{i=1}^{L}$, где $r_i = \big[r(x_i) \neq [y_i{=}y]\big]$. *Число ошибок* правила r на выборке $X \subseteq \mathbb{X}$ есть $m(r, X) = \sum\limits_{x_i \in X} r_i$.

Частота ошибок r на X есть $\nu(r, X) = \frac{1}{|X|} m(r, X)$.

Методом обучения называется отображение вида $\mu\colon 2^{\mathbb{X}} \to R$, которое произвольной обучающей выборке $X \subseteq \mathbb{X}$ ставит в соответствие некоторое правило $r = \mu X$ из R. Метод μ называется методом *минимизации эмпирического риска* (МЭР), если

$$\mu X \in R(X) = \operatorname{Arg}\min_{r \in R} m(r, X);$$

и *пессимистичным* методом МЭР, если

$$\mu X = \arg\max_{r \in R(X)} m(r, \mathbb{X});$$

Пессимистичный МЭР не реализуем на практике, т. к. контрольная выборка скрыта в момент обучения, однако для него удобно получать достижимые верхние оценки вероятности переобучения.

Разобъём выборку $\mathbb{X}$ всеми C_L^ℓ способами на две непересекающиеся подвыборки: обучающую X длины ℓ и контрольную $\bar{X}$ длины $k = L - \ell$, неизвестную в момент обучения. Предполагая, что все разбиения равновероятны (что эквивалентно стандартному предположению о независимости наблюдений в двух подвыборках), определим для любого $\varepsilon > 0$ *вероятность переобучения* метода μ:

$$Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) = \mathsf{P}\big[\nu(\mu X, \bar{X}) - \nu(\mu X, X) > \varepsilon\big], \quad (2)$$

где знак вероятности можно понимать как среднее по всем разбиениям: $\mathsf{P} \equiv \frac{1}{C_L^\ell} \sum\limits_{X \sqcup \bar{X}}$.

Возьмём в качестве R семейство правил (1) с полным набором признаков $\omega = \{1, \ldots, n\}$ и операцией сравнения $<$ по всем признакам. Нашей основной задачей будет получение оценок вероятности переобучения для данного семейства.

Структура классов эквивалентности

Два правила эквивалентны, $r \sim r'$, если их векторы ошибок совпадают, $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r'}$.

Допустим, что значения x_i^j каждого признака $j \in \omega$ попарно различны на объектах выборки $\mathbb{X}$. Это предположение будет, в частности, выполнено с вероятностью 1, если объекты x_i выбирались из непрерывного распределения на $\mathbb{R}^n$.

Пусть $x_j^{(i)}$ — i-й элемент в вариационном ряду значений j-го признака $x_j^{(1)} < \cdots < x_j^{(L)}$. Заменим в исходной матрице данных $\|x_i^j\|_{L \times n}$ каждое значение $x_j^{(i)}$ его рангом i в вариационном ряду. Очевидно, на этой матрице данных семейство R индуцирует то же множество векторов ошибок, что и на исходной. Поэтому далее будем полагать, что все признаки принимают целые значения $1, \ldots, L$, и никакие два объекта не имеют равных значений одного и того же признака. Значения порогов c^j в правилах $r(x; c^1, \ldots, c^n)$ вида (1) также имеет смысл выбирать только из целых значений $0, \ldots, L$

Будем говорить, что правила *связаны*, если их векторы ошибок различаются только на одном объекте. Заметим, что число классов эквивалентности и граф связей зависят от значений признаков $\|x_i^j\|$, но не зависят от классификаций y_i.

Пусть u и v — произвольные объекты из $\mathbb{X}$. Будем говорить, что объект u *доминируется* объектом v по координате j, если $u^j < v^j$. Будем говорить, что объект u *доминируется* множеством объектов $S \subseteq \mathbb{X}$ и писать $u \prec S$, если для каждого $j \in \omega$ существует объект $s \in S$, такой, что $u^j < s^j$. Если множество S состоит из одного элемента s и $u \prec S$, то будем писать $u \prec s$.

Определение 1. *Подмножество $S \subseteq \mathbb{X}$ называется недоминирующимся, если любой объект $s \in S$ не доминируется подмножеством $S \backslash s$.*

Обозначим множество всех недоминирующихся подмножеств мощности q через M_q,

$$M_q = \big\{S \subseteq \mathbb{X}\colon |S| = q,\ \forall s \in S\ \ s \not\prec S \backslash s\big\}.$$

Введем искусственное недоминирующееся подмножество S_0, состоящее из одного объекта $x_0 = (0, \ldots, 0)$. Обозначим $M_0 = \{S_0\}$.

Мощность произвольного недоминирующегося подмножества $|S|$ не превышает n. Если подмножество S недоминирующееся, то любое его подмножество $S' \subset S$ также недоминирующееся. Очевидно, $M_q \leqslant C_L^q$, причём эта оценка достигается на выборке $\mathbb{X}$, все элементы которой попарно несравнимы. Для построения всех $S \in M_q$ достаточно добавить к каждому подмножеству $S' \in M_{q-1}$ один объект, еще не входящий в него; если полученное подмножество недоминирующееся, то оно войдет в M_q.

Лемма 1. *Для любого объекта x из недоминирующегося подмножества S найдется хотя бы один признак $j \in \omega$, по которому на данном x достигается $\max\limits_{s \in S} s^j$, причём $\bigcup\limits_{j=1}^{n} \operatorname{Arg}\max\limits_{s \in S}(s^j) = S$.*

Поставим в соответствие подмножеству S правило $r(x, S) = r(x; \max\limits_{x \in S} x^1, \ldots, \max\limits_{x \in S} x^n)$. Очевидно, разным S ставятся в соответствие разные $r(x, S)$, т. к. значения каждого признака $x_i^j,\ i = 1, \ldots, L$ попарно различны. Следовательно, зная j и x_i^j, можно однозначно указать объект x_i. Следовательно, набор параметров $c^j = \max\limits_{x \in S} x^j,\ j = 1, \ldots, n$ задаёт подмножество S однозначно, и различным S не могут соответствовать одинаковые $r(x, S)$.

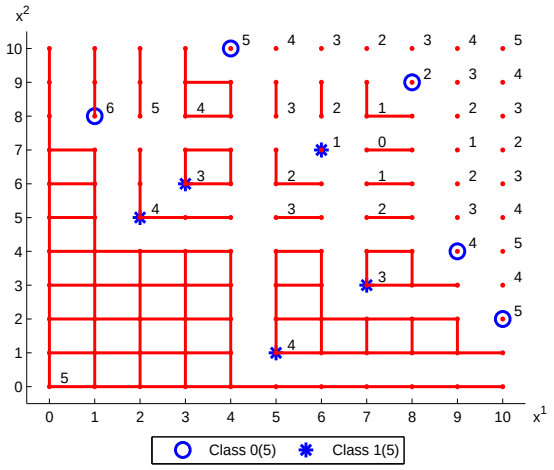


Рис. 1. Двумерная выборка длины $L = 10$, по 5 объектов в каждом классе (отмечены крупными точками).

На рис. 1 показан пример задачи с $n = 2$ признаками, $L = 10$ объектами и семейство правил $R = \{r(x; c^1, c^2) = [x^1 \leqslant c^1]\,[x^2 \leqslant c^2] \colon x \in \mathbb{X}\}$. Каждое правило из R задается парой порогов (c^1, c^2), поэтому правилам соответствуют узлы прямоугольной сетки $H = \{0, \ldots, L\}^2$. Эквивалентные правила соединены отрезками. Рядом с каждым классом эквивалентности подписано число ошибок на полной выборке $m(r, \mathbb{X})$. Все одноэлементные подмножества являются недоминирующимися. Среди двухэлементных подмножеств недоминирующимися являются только пары несравнимых объектов, например, пара объектов $\{(2, 5), (5, 1)\}$. Недоминирующихся подмножеств мощности больше 2 нет, т. к. размерность задачи $n = 2$.

Лемма 2. *Пусть $E \subset R$ — класс эквивалентности правил, $c^j(r)$ — j-й параметр правила r. Тогда классу E принадлежит также и правило*

$$r_E(x) = r\big(x; \min_{r' \in E} c^1(r'), \ldots, \min_{r' \in E} c^n(r')\big).$$

Будем называть правило $r_E(x)$ *стандартным представителем* класса эквивалентности E. На рис. 1 стандартные представители соответствуют левым нижним точкам каждого класса эквивалентности: $(0, 0)$, $(1, 8)$, $(2, 5)$, $(5, 1)$, и т. д.

Теорема 3. *Существует взаимно однозначное соответствие между множеством всех классов эквивалентности и множеством всех недоминирующихся подмножеств.*

Следствие 1. *Для каждого класса эквивалентности E существует единственное недоминирующееся подмножество S, такое, что $r_E(x) = r(x, S)$.*

Следствие 2. *Число классов эквивалентности равно* $\sum_{q=0}^{n} |M_q|$.

Оценка вероятности переобучения

Метод порождающих и запрещающих множеств [7] позволяет определить вероятность переобучения $Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X})$ точно, если для каждого правила $r \in R$ указана совокупность подмножеств $\{X_{rv}, X'_{rv} \subset \mathbb{X} \colon v \in V_r\}$ и коэффициенты c_{rv}, такие, что для любой подвыборки $X \subset \mathbb{X}$ длины ℓ

$$[\mu X = r] = \sum_{v \in V_r} c_{rv} [X_{rv} \subseteq X] [X'_{rv} \subseteq \bar{X}]. \qquad (3)$$

Подмножества X_{rv} называются *порождающими*, X'_{rv} — *запрещающими*. Указать такие подмножества всегда возможно, но не единственным способом. Чем меньше мощности множеств V_r, X_{rv}, X'_{rv}, тем эффективнее будет вычисляться оценка Q_ε.

Определение 2. *Множества объектов*

$$X_r = \bigcap_{v \in V_r} X_{rv}, \quad X'_r = \bigcap_{v \in V_r} X'_{rv}$$

называются фиксированными для правила r.

Фиксированные объекты обязаны присутствовать во всех порождающих и запрещающих множествах для того, чтобы метод обучения μ выбрал правило r по обучающей выборке X. Перепишем гипотезу (3) в виде верхней оценки:

$$[\mu X = r] \leqslant [X_r \subseteq X] [X'_r \subseteq \bar{X}]. \qquad (4)$$

Теорема 4. *Если справедливо* (4), *то*

$$Q_\varepsilon(\mu, \mathbb{X}) \leqslant \sum_{r \in R} P_r H_{L_r}^{\ell_r, m_r}(s_r(\varepsilon)), \qquad (5)$$

где $m_r = m(r, \mathbb{X} \setminus X_r \setminus X'_r)$ — число ошибок правила r на нефиксированных объектах, $L_r = L - |X_r \cup X'_r|$ и $\ell_r = \ell - |X_r|$ — число нефиксированных объектах в полной выборке и в обучающей соответственно, $P_r = C_{L_r}^{\ell_r} / C_L^\ell$ — верхняя оценка вероятности $\mathsf{P}[\mu X = r]$ получить правило r в результате обучения, $s_r(\varepsilon) = \frac{\ell}{L}(m(r, \mathbb{X}) - \varepsilon k) - m(r, X_r)$, $H_L^{l,m}(s)$ — функция гипергеометрического распределения [7].

Лемма 5. *Объекты недоминирующегося подмножества S такого, что $r(x, S) \sim r(x)$, являются фиксированными для правила r. Для правила r класса $y \in Y$ в X_r входят только объекты из S класса y, а в X'_r — объекты из S всех остальных классов.*

Лемма 6. *Пусть векторы ошибок правил r и q различаются только на одном объекте x класса y. Пусть $r(x) = 1$, $q(x) = 0$. Тогда чтобы пессимистичный метод МЭР выбрал правило q, объект x должен находиться в X'_q; а чтобы было выбрано правило r, объект x должен находиться в X_r.*

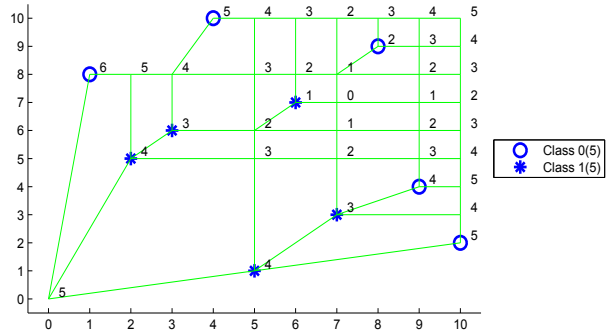


Рис. 2. Граф связей правил, показанных на рис. 1.

С помощью данных лемм строится часть фиксированных объектов. Рассмотрим граф связей между правилами, рис. 2. Каждая вершина этого графа — это стандартный представитель класса эквивалентности, а связь между вершинами означает, что векторы ошибок правил различаются на одном объекте. Упорядочим все правила по числу ошибок на полной выборке $\mathbb{X}$. Применим следующее правило обхода графа. Допустим, мы находимся в вершине, соответствующей правилу r; тогда по лемме 6 мы можем указать, какие объекты отнести к контрольным для всех правил q, имеющих на одну ошибку больше, и в то же время расширим число фиксированных объектов на обучении для правила r. По лемме 5 мы также можем зафиксировать несколько объектов для правила r.

Заметим, что в рамках теории Вапника-Червоненкиса возможно получить оценку с аналогичной структурой [5]: $Q_\varepsilon \leqslant \sum\limits_{r\in R} H_L^{\ell,m_r}\big(\frac{\ell}{L}(m_r - \varepsilon k)\big)$, где $m_r = m(r,\mathbb{X})$. Эта оценка учитывает расслоение семейства правил R по уровням числа ошибок m_r. Оценка (5) более точна за счет учета связности. Чем точнее будут верхние оценки вероятностей P_r, тем точнее будет и оценка (5).

Эксперименты и выводы

Положим $n = 2$, $Y = \{0, 1\}$, $L = 100$, по 50 объектов в каждом классе. Возьмём три модельных выборки «Correct», «Noise» и «Random», отличающихся только классификацией объектов. Для выборки «Correct» существует правило, разделяющее два класса без ошибок. Выборка «Noise» получается из «Correct» небольшим зашумлением: для четырёх пограничных объектов класс меняется на противоположный. Выборка «Random» получается случайным назначением классов всем объектам. В качестве ориентира используем оценки $\hat{Q}_\varepsilon$ методом Монте-Карло по 100 случайным разбиениям $\mathbb{X} = X \sqcup \bar{X}$, см. рис. 3.

График на рис. 4 показывает, что завышенность оценки (5) тем больше, чем менее точной является закономерность, содержащаяся в выборке.

График на рис. 5 показывает, что завышенность полученных оценок относительно невелика.

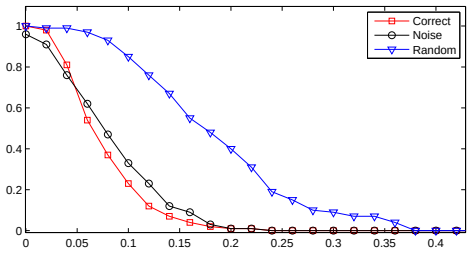


Рис. 3. Зависимость $\hat{Q}_\varepsilon$ от ε для трёх выборок.

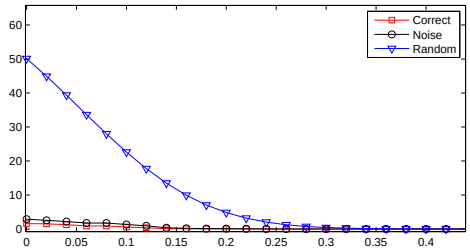


Рис. 4. Зависимость верхней оценки Q_ε, вычисленной по формуле (5), от ε, для трёх выборок.

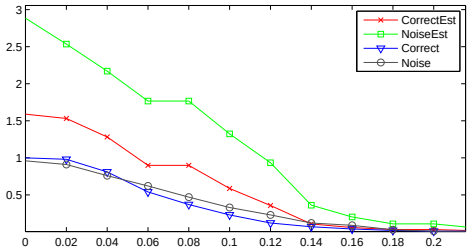


Рис. 5. Сравнение зависимостей $\hat{Q}_\varepsilon$ и Q_ε от ε для выборок «Correct» и «Noise».

Литература

[1] *Вапник В Н., Червоненкис А. Я.* Теория распознавания образов. — М.: Наука, 1974.

[2] *Донской В. И., Башта А. И.* Дискретные модели принятия решений при неполной информации. — Симферополь: Таврия, 1992. — 166 с.

[3] *Кочедыков Д. А., Ивахненко А. А., Воронцов К. В.* Применение логических алгоритмов классификации в задачах кредитного скоринга и управления риском кредитного портфеля банка // Всеросс. конф. ММРО-13, 2007. — С. 484–488.

[4] *Martin J. K.* An exact probability metric for decision tree splitting and stopping // Machine Learning. — 1997. — Vol. 28, No. 2–3. — Pp. 257–291.

[5] *Vorontsov K. V.* Combinatorial probability and the tightness of generalization bounds // Patt. Rec. and Image Anal. — 2008. — Vol. 18, No. 2. — Pp. 243–259.

[6] *Vorontsov K. V.* Splitting and similarity phenomena in the sets of classifiers and their effect on the probability of overfitting // Patt. Rec. and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 3. — Pp. 412–420.

[7] *Vorontsov K. V.* Exact combinatorial bounds on the probability of overfitting for empirical risk minimization // Patt. Rec. and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 269–285.

k-сингулярные системы, приложения в алгебраическом подходе к распознаванию*

Карпович П. А., Дьяконов А. Г.
pkarpovich@mail.ru, djakonov@mail.ru
Москва, факультет ВМК МГУ им. М. В. Ломоносова

Представлены некоторые результаты исследований матриц попарных расстояний систем точек. Задачи, связанные с такими матрицами, возникают в теории интерполяции и алгебраическом подходе к распознаванию (классификации). В частности, невырожденность матрицы соответствует корректности модели алгоритмов (реализации произвольной классификации контрольной выборки с помощью алгоритмов этой модели). Рассмотрена задача разбиения системы точек на подсистемы с невырожденными матрицами попарных расстояний. Такое разбиение позволяет делить признаковое пространство задачи распознавания на области компетентности (в каждой области возможна точная классификация контрольных объектов алгоритмом из простой модели).

k-singular systems, applications to the algebraic approach to pattern recognition problems*

Karpovich P. A., D'yakonov A. G.
Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics of MSU, Moscow, Russia

This paper presents some results of studies of distance matrices. Problems associated with such matrices arise in the interpolation theory and algebraic approach to pattern recognition (classification). In particular, the singularity of the matrix corresponds to the correctness of algorithm's model (realization of an arbitrary classification on control set by model algorithms). Authors propose an algorithm for partitioning a system of points on subsystems with nonsingular distance matrices. This partition allows you to divide feature space into parts of competence (in each part the correct classification of control set can be obtain by simple algorithm).

Введение

В [1] академиком РАН Ю. И. Журавлёвым был предложен алгебраический подход к решению задач распознавания (классификации). Поскольку большинство алгоритмов классификации решает задачу в два этапа: сначала получает матрицу оценок принадлежностей объектов классам, а затем по ней классифицирует объекты, можно «зафиксировать» второй этап и ввести над алгоритмами операции, индуцированные операциями над матрицами оценок. Таким образом можно получать новые алгоритмы в виде алгебраических выражений над уже построенными.

Основной результат алгебраического подхода [1] заключался в том, что с помощью полиномов над алгоритмами можно решить любую регулярную задачу распознавания. Регулярность отражала необременительные требования на условие задачи (см. ниже). Результат первоначально был получен для модели кусочно-линейных классификаторов и модели алгоритмов вычисления оценок (АВО), которая является универсальным языком описания многих распознающих процедур. Возможность решения любой задачи была формализована через требование корректности модели — возможность получить любую матрицу оценок с помощью алгоритмов модели. В [2] показано, что корректность модели необходима и достаточна для реализации произвольной классификации.

Критерии корректности алгебраических замыканий конечных степеней (множеств полиномов ограниченной степени над алгоритмами модели) были впервые получены академиком РАН В. Л. Матросовым [3]. В [4] удалось найти метрические критерии корректности, которые и породили исследования k-сингулярности в теории распознавания [5]–[8].

Ниже описана постановка задачи распознавания, обобщённая модель АВО и основные понятия алгебраического подхода, показана связь корректности модели алгебраических выражений специального вида над АВО с k-сингулярностью системы точек. Даётся обзор некоторых известных критериев k-сингулярности, а также новых результатов, полученных авторами.

Модель АВО для решения задач распознавания (классификации)

Опишем постановку задачи распознавания (классификации) [9], немного обобщив её. *Множество допустимых объектов* M содержит объединение множеств $K_j,\ j = 1, \ldots, l$, называемых *классами*. Каждому объекту $S \in M$ соответствует бинарный *вектор классификации* $\tilde{\alpha}(S) = (\alpha_j(S))_{j=1}^{l}$, где $\alpha_j(S)$ — значение предиката «$S \in K_j$», $j = 1, \ldots, l$. Для каждой пары $(S^t, S_i) \in M \times M$ мож-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-07-00609.

но вычислить значения функций

$$\rho_\Omega(S^t, S_i) \in \mathrm{E}_Z,\ \Omega \in \Omega_Z,$$

где Ω_Z — конечное множество параметров, E_Z — частично упорядоченное множество. *Задача распознавания* состоит в том, чтобы построить алгоритм A, который по набору $\tilde{S}^m = \{S^t\}_{t=1}^m$ *эталонных* объектов с известными векторами $\{\tilde{\alpha}(S^t)\}_{t=1}^m$ для набора $\tilde{S}_q = \{S_t\}_{t=1}^q$ *контрольных* объектов строит их векторы классификаций — *классифицирует* (распознаёт).

Для решения задач распознавания часто применяется модель АВО (см. [9], [10]). Приведём описание обобщённой модели АВО. Алгоритм в ней является суперпозицией распознающего оператора B и решающего правила C: $A = B \cdot C$. Для объектов из $\tilde{S}_q$ оператор B получает матрицу $\Gamma[B] = \|\Gamma_{ij}[B]\|_{q\times l}$, ij-й элемент которой — *оценка принадлежности объекта S_i к классу K_j*:

$$\Gamma_{ij}[B] = \sum_{a,b=0,0}^{1,1} x_{abj} \sum_{\Omega\in\Omega_A} \sum_{S^t\in\tilde{K}_j^a} w^t w(\Omega) \mathrm{B}_\Omega^{\tilde{e},b}(S^t, S_i),$$

где $w^t \in \mathbb{R}^+ = \{x \in \mathbb{R} \mid x \geqslant 0\}$ при $t \in \{1,\ldots,m\}$ — *вес t-го объекта*, $w(\Omega) \in \mathbb{R}^+$ при $\Omega \in \Omega_A$ — *вес учёта Ω-й близости*, $\tilde{e} \in \mathrm{E}_Z$, $\mathrm{B}_\Omega^{\tilde{e},b}(S^t, S_i)$ — *функция близости* такая, что

$$\mathrm{B}_\Omega^{\tilde{e},1}(S^t, S_i) = 1 - \mathrm{B}_\Omega^{\tilde{e},0}(S^t, S_i) = \begin{cases} 1, & \rho_\Omega(S^t, S_i) \leqslant \tilde{e}; \\ 0, & \rho_\Omega(S^t, S_i) \nleqslant \tilde{e}; \end{cases}$$

$$\tilde{K}_j^a = \begin{cases} \tilde{S}^m \cap K_j, & a = 1; \\ \tilde{S}^m \backslash K_j, & a = 0. \end{cases}$$

В этой работе для простоты считаем, что $\Omega_A = \Omega_Z$ и $x_{ab} = x_{abj} \in \{0, (-1)^{a+b}\}$ для всех $j = 1,\ldots,l$, $(a,b) \in \{0,1\}^2$ (*модель без нормировок*). Простейшее решающее правило — *пороговое правило C_c*: $C_c(\|\Gamma_{ij}[B]\|_{q\times l}) = \|\alpha_{ij}\|_{q\times l}$,

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} 1, & \Gamma_{ij}[B] \geqslant c; \\ 0, & \Gamma_{ij}[B] < c, \end{cases}$$

$(i,j) \in QL$, $QL = \{1,\ldots,q\} \times \{1,\ldots,l\}$ (дальше будем часто использовать это обозначение), $c \in \mathbb{R}$.

Операции над распознающими операторами индуцируются операции над их матрицами оценок:

$$\Gamma[B_1 + B_2] = \Gamma[B_1] + \Gamma[B_2],$$

$$\Gamma[cB] = c\Gamma[B], \quad \Gamma[B_1 \cdot B_2] = \Gamma[B_1] \circ \Gamma[B_2],$$

умножение $\circ$ поэлементное. Для множества B^* всех операторов рассматриваемой модели АВО вводим понятия: *линейного замыкания*

$$\mathbf{L}(B^*) = \{c_1B_1 + \ldots + c_rB_r \mid r \in \mathbb{N}, \\ c_1,\ldots,c_r \in \mathbb{R},\ B_1,\ldots,B_r \in B^*\},$$

алгебраического замыкания k-й степени

$$\mathbf{U}^k(B^*) = \mathbf{L}(\{B_1 \cdot \ldots \cdot B_s \mid B_1,\ldots,B_s \in B^*, \\ 1 \leqslant s \leqslant k\}),$$

алгебраического замыкания $\mathbf{U}(B^*) = \bigcup\limits_{k=1}^{\infty} \mathbf{U}^k(B^*)$.

Для матрицы H через $\mathbf{U}^k(H)$ обозначаем множество всех значений полиномов степени не выше k над столбцами этой матрицы (умножение поэлементное).

Матрицы попарных расстояний в алгебраическом подходе

Пусть $i \sim_{\Omega,t}^1 a$ тогда и только тогда, когда $\rho_\Omega(S^t, S_i) = \rho_\Omega(S^t, S_a)$ (объекты S_i, S_a неотличимы «с точки зрения» t-го эталона и Ω-й близости), а $j \sim_t^2 b$ тогда и только тогда, когда $\alpha_j(S^t) = \alpha_b(S^t)$ (классы K_j, K_b неотличимы «с точки зрения» t-го эталона). Требование регулярности задачи заключается в том, что не существует пары $(i,a) \in \{1,\ldots,q\}^2$, $i \neq a$, для которой $i \sim_{\Omega,t}^1 a$ при всех $\Omega \in \Omega_A$, $t \in \{1,\ldots,m\}$, и не существует пары $(j,b) \in \{1,\ldots,l\}^2$, $j \neq b$, для которой $j \sim_t^2 b$ при всех $t \in \{1,\ldots,m\}$.

Теорема 1. *Пусть в регулярной задаче распознавания $ql > 1$, тогда функция $p_k\colon QL \times QL \to [0,1]$, $p_k\big((i,j),(a,b)\big) =$*

$$= 1 - \left(\frac{\big|\big\{(\Omega,t) \mid (i \sim_{\Omega,t}^1 a)\&(j \sim_t^2 b)\big\}\big|}{|\Omega_A|m}\right)^k$$

является метрикой из конуса разрезных метрик CUT_{ql}, для которой $\mathbf{U}^k(B^*) = \mathbf{L}\big(\{P_{(a,b)}\}_{(a,b)\in QL}\big)$ при $\Gamma_{ij}[P_{(a,b)}] = p_k\big((i,j),(a,b)\big)$, $(i,j) \in QL$.

Таким образом, существует метрика на множестве QL, которая полностью описывает алгебраическое замыкание k-й степени, поскольку определяет операторы базы этого замыкания. Метрика лежит в разрезном конусе CUT_{ql} [11], в котором содержатся все l_1-полуметрики на всевозможных ql-точечных множествах пространств $\mathbb{R}^r$, $r \in \mathbb{N}$. Внутренность конуса описывает всевозможные задачи распознавания «с точки зрения алгебраического подхода», что формализует следующая

Теорема 2. *Для любой метрики ρ из конуса CUT_q (задана на q-элементном множестве), $q > 1$, существует задача распознавания с одним классом, в которой множество матриц (векторов) оценок операторов из $\mathbf{L}(B^*)$ совпадает со множеством $\mathbf{U}^1(P)$, где P — матрица попарных расстояний метрики ρ.*

Теорема 3. *Следующие условия эквивалентны:*

1. *Замыкание $\mathbf{U}^k(B^*)$ корректно.*

2. *Определитель $ql \times ql$-матрицы P_k попарных расстояний метрики p_k отличен от нуля.*
3. *Пространство $\mathbf{U}^k(P_1)$ имеет размерность ql.*

Таким образом, определение корректности эквивалентно проверке вырожденности матрицы попарных l_1-расстояний. В некоторых частных случаях (для специальных задач распознавания и моделей алгоритмов, см. [8]) матрица имеет меньшие размеры и выписывается не для системы QL, а для контрольных объектов задачи (на них вводится нужная метрика). Для таких случаев описываемые ниже критерии вырожденности матриц попарных l_1-расстояний имеют простую геометрическую интерпретацию.

k-сингулярные системы точек

Пусть задана система попарно различных точек $S = \{\tilde{s}_i\}_{i=1}^q$ пространства $\mathbb{R}^m$, $|S| = q \geqslant 2$. В этом и следующих разделах используем свои обозначения (не имеющие отношения к обозначениям предыдущих разделов), хотя для некоторых типов задач распознавания [8] число точек в системе совпадает с числом контрольных объектов, а размерность пространства — с числом эталонов (т. е. имеется полная аналогия в обозначениях). Через $(\tilde{s}_i)_t$ будем обозначать t-ю координату точки $\tilde{s}_i$.

Определение 1. *Система точек S называется k-сингулярной, если размерность пространства $\mathbf{U}^k[S] = \mathbf{U}^k(P_S)$ меньше q, где P_S — матрица попарных l_1-расстояний системы точек S.*

Напомним некоторые критерии k-сингулярности, полученные авторами ранее (см. [5, 6]; обзор некоторых известных критериев 1-сингулярности можно найти в [12]). Отметим, что задача о критериях вырожденности матриц попарных расстояний известна с начала 20 века. Из классической серии работ И. Шенберга (см. полный перечень ссылок в [12]) следует, что матрица невырождена для конечной системы $\{\tilde{s}_i\}_{i=1}^q$ попарно различных точек пространства $\mathbb{R}^m$ и метрики l_p, $p \in (1, 2]$, $q > 1$. Особый интерес представляет случай $p = 1$, для которого критерий вырожденности был получен только в 1993 году [12]. Здесь мы рассматриваем более общую задачу: о критериях неполноты размерности пространства значений полиномов ограниченной степени от столбцов матрицы попарных l_1-расстояний (операция умножения поэлементная).

Теорема 4. *Пусть z — биективное отображение множества $\{1, \ldots, C_m^k\}$ на множество сочетаний без повторений объема k (из множества $\{1, \ldots, m\}$). Система точек $\{\tilde{s}_i\}_{i=1}^q$ является k-сингулярной тогда и только тогда, когда является 1-сингулярной система точек $\{\tilde{d}_i\}_{i=1}^q$ пространства $\mathbb{R}^{C_m^k}$ такая, что для всех $t \in \{1, \ldots, C_m^k\}$ справедливо*

$$(\tilde{d}_i)_t = (\tilde{d}_j)_t \quad \Leftrightarrow \quad \forall r \in z(t) \quad (\tilde{s}_i)_r = (\tilde{s}_j)_r.$$

Пусть G — минимальная группа (с операцией суперпозиция), содержащая преобразования $g_{t,x,y} \colon \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ при всех $t \in \{1, \ldots, m\}$, $x \in \mathbb{R}$, $y \in \mathbb{R}$: $g_{t,x,y}\big((s_1, \ldots, s_m)\big) =$

$$= \begin{cases} (s_1, \ldots, s_m) & s_t \notin \{x, y\}; \\ (s_1, \ldots, s_{t-1}, y, s_{t+1}, \ldots, s_m), & s_t = x; \\ (s_1, \ldots, s_{t-1}, x, s_{t+1}, \ldots, s_m), & s_t = y. \end{cases}$$

Для любого преобразования $g \in G$ справедливо равенство $\mathbf{U}^k[S] = \mathbf{U}^k[g(S)]$, где $g(S) = \{g(\tilde{s}_i)\}_{i=1}^q$, поэтому k-сингулярность не зависит от действия группы G.

Теорема 5. *Система точек $S = \{\tilde{s}_i\}_{i=1}^q$ является 1-сингулярной тогда и только тогда, когда существует такое подмножество $X \subseteq \{1, \ldots, q\}$, что для любого преобразования $g \in G$ система точек $\{g(\tilde{s}_i)\}_{i \in X}$ не отделима от системы точек $\{g(\tilde{s}_i)\}_{i \in \{1,\ldots,q\} \setminus X}$ гиперплоскостью.*

Из теоремы следует вид разделяющих поверхностей алгоритмов линейного замыкания модели ABO с пороговым решающим правилом. Алгоритмы разделяют с помощью суперпозиции элемента группы G и гиперплоскости. В некоторых специальных классах задач такое разделение происходит в признаковом пространстве. В общем случае разделение осуществляется для системы точек QL, т. е. в пространстве пар «контрольный объект» — «класс».

Новые результаты теории k-сингулярных систем

Критерий k-сингулярности также можно сформулировать в виде условия существования линейной зависимости «антипотенциальных» функций $\rho^k(\tilde{s}, \tilde{s}_i)$ (для $k = 1$ он был сформулирован в [5], в общем случае — в [6]):

Теорема 6. *Система точек $S = \{\tilde{s}_i\}_{i=1}^q$ пространства $\mathbb{R}^m$ является k-сингулярной тогда и только тогда, когда существует ненулевой вектор $(c_1, \ldots, c_q)$, для которого при всех $\tilde{s} \in \mathbb{R}^m$ справедливо равенство $\sum\limits_{i=1}^{q} c_i \rho^k(\tilde{s}, \tilde{s}_i) = 0$, где ρ — метрика Хэмминга или l_1-метрика.*

Рассмотрим задачу разделения произвольной системы точек в $\mathbb{R}^m$ на минимальное число подсистем, каждая из которых не является 1-сингулярной. Эффективный алгоритм разделения позволит разбивать признаковое пространство

на области компетентности алгоритмов [13]. Например, искать решение в виде коллектива алгоритмов, каждый из которых принадлежит линейному замыканию модели ABO.

Можно показать, что произвольному конечному множеству точек S соответствует матроид [14], для которого в качестве носителя выбрана сама система S, а независимыми подмножествами являются подсистемы без свойства 1-сингулярности. Таким образом, задача о разделения на подсистемы без 1-сингулянтности сводится к задаче разделения носителя матроида на минимальное число независимых подмножеств. Эффективные алгоримы решения данной задачи можно найти в работах [15, 16].

Оценку минимального числа подсистем без 1-сингулярности даёт

Теорема 7. *Произвольная система* $S = \{\tilde{s}_i\}_{i=1}^{q}$ *точек в* $\mathbb{R}^m$ *может быть разбита на*

$$\left\lceil \frac{\prod_{t=1}^{m} c_t}{\sum_{t=1}^{m} c_t + 1 - m} \right\rceil \qquad (1)$$

подмножеств с невырожденными матрицами попарных l_1*-расстояний, где*

$$c_t = \left|\left\{(\tilde{s}_i)_t \,|\, i \in \{1, \ldots, q\}\right\}\right|$$

— количество значений, которые принимает t*-я координата точек из системы* S*.*

Оценка (1) является точной: системы, являющиеся декартовыми произведениями $\overset{m}{\underset{t=1}{\times}} X_t$ конечных числовых множеств X_t, нельзя разбить на меньшее число подсистем с невыроженными матрицами попарных расстояний.

Другие приложения теории k-сингулярности

Задача о размерности пространства значений полиномов ограниченной степени над столбцами матрицы попарных расстояний имеет приложения не только в теории распознавания (см. теорему 3, [8]), но и в теории интерполяции: выяснение возможности представления функции, заданной лишь на конечном множестве, в виде суммы функций из определенного класса часто сводится к анализу матрицы попарных расстояний точек этого множества. Например, точное представление функции в классе радиальных базисных функций (RBF) [17] или жестких функций (riddle functions) [12] возможно тогда и только тогда, когда такая матрица попарных l_p-расстояний невырождена. В частности, в [8] отмечается, что система точек S не является k-сингулярной при $k \leqslant m$ тогда и только тогда, когда любая функция $f(x_1, \ldots, x_m)$ на точках системы S может быть представлена в виде конечной суммы функций, каждая из которых зависит от k переменных.

Литература

[1] *Журавлёв Ю. И.* Корректные алгоритмы над множествами некорректных (эвристических) алгоритмов. II // Кибернетика. — 1977. — № 6. — С. 21–27.

[2] *Дьяконов А. Г.* Корректность относительно семейства решающих правил // Искусственный интеллект. — 2006. — № 2. — С. 61–64.

[3] *Матросов В. Л.* О критериях полноты модели алгоритмов вычисления оценок и её алгебраических замыканий // Докл. АН СССР. — 1981. — Т. 258, № 4. — С. 791–796.

[4] *Дьяконов А. Г.* Критерии корректности алгебраических замыканий модели алгоритмов вычисления оценок // Докл. РАН. — 2008. — Т. 420, № 6. — С. 732–735.

[5] *Дьяконов А. Г.* Проблема Шёнберга: критерий вырожденности матрицы l_1-расстояний // Spectral and Evolution Problems, 2009. — V. 19. — Pp. 44–49.

[6] *Карпович П. А.* Критерий k-сингулярности системы точек и оптимальное разбиение на подсистемы // XVI Междунар. конф. «Ломоносов»: секция ВМК. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 33.

[7] *Карпович П. А.* Разделение системы точек на подмножества с невырожденными матрицами попарных расстояний // XVII Междунар. конф. «Ломоносов»: секция ВМК. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 87.

[8] *Карпович П. А., Дьяконов А. Г.* Критерий k-сингулярности систем точек в алгебраическом подходе к распознаванию // Всеросс. конф. ММРО-14, Суздаль, 2009. — С. 41–44.

[9] *Журавлёв Ю. И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Пробл. кибернетики. — 1978. — Вып. 33. — С. 5–68.

[10] *Журавлёв Ю. И, Рязанов В. В., Сенько О. В.* «РАСПОЗНАВАНИЕ». Математические методы. Программная система. Практические применения. — М.: Фазис, 2006. — 176 с.

[11] *Деза М. М., Лоран М.* Геометрия разрезов и метрик. — М.: МЦНМО, 2001. — 736 с.

[12] *Reid L. Sun X.* Distance matrices and ridge function interpolation // Constr. Approx. — 1993. — V. 45. — Pp. 1313–1323.

[13] *Растригин Л. А., Эренштейн Р. Х.* Коллективные правила распознавания. — М.: Энергия, 1981. — 244 с.

[14] *Schrijver A.* Combinatorial optimization: polyhedra and efficiency. V.1 — Springer, 2003. — Pp. 651-761.

[15] *Edmonds J.,* Matroid Partition. // Math. of the Decision Sciences, Amer. Math Soc. Lectures in Appl. Math., 11. — 1968.— Pp. 335–345.

[16] *Knuth D. E.,* Matroid patrtitioning. // Stanford University STAN-CS-73-342. — 1973. — Pp. 1–12.

[17] *Baxter B. J. C.* Conditionally positive functions and p-Norm distance matrices // Constr. Approx. — 1991. — № 7. — Pp. 427–440.

Об одном метрическом аналоге метода главных компонент*

Майсурадзе А. И.
maysuradze@cs.msu.su
Москва, МГУ имени М. В. Ломоносова

Предлагается, формализуется и исследуется метод сокращения размерности метрических описаний объектов. Формализация метода аналогична классическому методу главных компонент с дополнительными метрическими требованиями. Доказано, что качество аппроксимации и важные свойства главных компонент не ухудшаются по сравнению с классическим методом.

On a metric analogue of PCA*

Maysuradze A. I.
Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

A dimensionality reduction method for metric descriptions is proposed and researched. The formalization is analogous to the classical PCA with the additional metric requirements. The quality of approximation and the useful properties of principal components are proved to retain.

В интеллектуальном анализе данных классическим является представление информации об объектах в виде признаковых описаний. Общеизвестны проблемы, которые возникают при плохом наборе признаков или при достаточно большом их количестве. Чтобы справиться с такими проблемами, предложены различные подходы, в числе которых выделяют методы понижения размерности описаний. Один из наиболее известных — это метод главных компонент (Principal components analysis, PCA). Классический МГК [1] может быть сформулирован как задача аппроксимации числовых признаковых описаний объектов, причем на признаки не накладываются никакие дополнительные ограничения.

В настоящее время всё больше прикладных и теоретических работ ориентировано на описание объектов не признаками, а попарными расстояниями между объектами. Такие описания назовём метрическими. При этом возникают и требуют решения проблемы, аналогичные проблемам признаковых описаний (например, см. [2]). В работе предложен и исследован аналог метода главных компонент для метрических описаний. На получаемое новое метрическое описание малой размерности накладывается дополнительное ограничение: каждая новая компонента описания должна удовлетворять аксиомам полуметрики. Рассматриваемый метод назван метрическим методом главных компонент.

Рассматривается понижение размерности метрического описания для конечной выборки объектов. Доказано, что дополнительные требования не снижают качества аппроксимации. Показано, что «привлекательные» свойства классического метода главных компонент сохраняются: главные компоненты можно вычислять частично, они годятся сразу для всех размерностей аппроксимации, главные компоненты ортонормированы и можно удобно переходить от старых описаний к новым. Проанализирована необходимость свободного члена при аппроксимации метрических описаний.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-07-92652.

Основные понятия

В работе используется стандартное определение метрики и полуметрики. Через $[1, m]$ обозначим множество натуральных чисел от 1 до m. Через q обозначим число объектов обрабатываемой выборки.

Определение 1. *Любая функция* $\boldsymbol{f}\colon [1, q] \to \mathbb{R}$ *называется (числовым) признаком.*

Определение 2. *Функция* $\hat{r}\colon [1, q]^2 \to \mathbb{R}$ *называется конфигурацией сходства, если для любых* x *и* y *из* $[1, q]$ *она удовлетворяет условиям:*

1) $\hat{r}(x, x) = 0$;
2) $\hat{r}(x, y) = \hat{r}(x, y)$.

Если для конфигурации сходства $\hat{r}$ выполнены все аксиомы полуметрики, то говорим, что конфигурация удовлетворяет метрическим требованиям, и пишем $\hat{r} \in \mathrm{MET}$. В данной работе под метрическими условиями понимаются лишь аксиомы полуметрики, а не метрики.

Хотя конфигурацию сходства можно представить как симметричную матрицу с нулями на главной диагонали, в данной работе мы будем воспринимать конфигурацию сходства как вектор длины $t = \binom{n}{2} = n(n-1)/2$ и писать $\hat{r} \in \mathbb{R}^t$. Крышечка облегчает выделение в тексте конфигураций сходства и напоминает об их векторной интерпретации. Признаки мы будем воспринимать как векторы длины q и писать $\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^q$.

Через $\hat{1}$ обозначим метрическую конфигурацию, соответствующую метрике пространства изо-

лированных точек, т. е. расстояние между любыми объектами равно 1.

Метрические описания

При работе с классическими признаковыми описаниями один объект описывается вектором значений разных признаков. При работе с метрическими описаниями пара объектов описывается вектором различных расстояний [3]. Через n обозначим число признаков в признаковых описаниях или число конфигураций сходства в метрических описаниях. Признаковые описания выборки представляются матрицей данных вида

$$X = (\boldsymbol{f}_1 \dots \boldsymbol{f}_n) = (\boldsymbol{x}_1 \dots \boldsymbol{x}_q)^\intercal = \begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{q1} & \dots & x_{qn} \end{pmatrix},$$

где признак $\boldsymbol{f}_j \in \mathbb{R}^q$ и признаковое описание объекта $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^n$. Метрические описания выборки представляются матрицей данных вида

$$Y = (\hat{\rho}_1 \dots \hat{\rho}_n) = (\boldsymbol{y}_1 \dots \boldsymbol{y}_t)^\intercal = \begin{pmatrix} y_{11} & \dots & y_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ y_{t1} & \dots & y_{tn} \end{pmatrix},$$

где конфигурация сходства $\hat{\rho}_j \in \mathbb{R}^t$ и метрическое описание пары объектов $\boldsymbol{y}_i \in \mathbb{R}^n$.

Формализация задачи метода

Чтобы ниже было легче проводить аналогии, напомним задачу классического МГК, которую сформулируем как задачу аппроксимации набора векторов в линейном многообразии меньшей размерности. В линейном векторном пространстве $\mathbb{R}^n$ для заданного набора точек $\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_q$ требуется найти такое линейное многообразие L заданной меньшей размерности k, проекции исходных точек на которое в среднеквадратичном смысле ближе всего к исходным точкам. Иными словами, для заданной матрицы признаковых описаний X требуется найти такие $\boldsymbol{a}_0, \dots, \boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^n$, определяющие

$$L_k = \{\boldsymbol{a}_0 + g_1\boldsymbol{a}_1 + \dots + g_k\boldsymbol{a}_k \mid g_1, \dots, g_k \in \mathbb{R}\},$$

и такие $\boldsymbol{g}_1, \dots, \boldsymbol{g}_k \in \mathbb{R}^q$, которые доставляют минимум функционалу ошибки аппроксимации

$$Q = \sum_{i=1}^{q} \operatorname{dist}^2_{\text{euclid}}(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{a}_0 + g_{1i}\boldsymbol{a}_1 + \dots + g_{ki}\boldsymbol{a}_k) = \\ = \|X - (\mathbf{1}\,\boldsymbol{g}_1\ \dots\ \boldsymbol{g}_k) \times (\boldsymbol{a}_0\,\boldsymbol{a}_1\ \dots\ \boldsymbol{a}_k)^\intercal\|_2^2 .$$

Это задача безусловной оптимизации. Вектор $\boldsymbol{a}_0$ называется свободным членом модели МГК, векторы $\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_k$ называются главными компонентами, векторы $\boldsymbol{g}_1, \dots, \boldsymbol{g}_k$ называются новыми признаками и составляют новое признаковое описание.

Задачу метрического МГК сформулируем как задачу условной оптимизации.

Задача 1 (метрического МГК). Для заданной матрицы метрических описаний Y требуется найти такие $\boldsymbol{a}_0, \dots, \boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^n$, определяющие

$$L_k = \{\boldsymbol{a}_0 + g_1\boldsymbol{a}_1 + \dots + g_k\boldsymbol{a}_k \mid g_1, \dots, g_k \in \mathbb{R}\},$$

и такие $\hat{r}_1, \dots, \hat{r}_k \in \text{МЕТ}$, которые доставляют минимум функционалу ошибки аппроксимации

$$Q = \left\|(\hat{\rho}_1 \dots \hat{\rho}_n) - (\hat{1}\,\hat{r}_1\ \dots\ \hat{r}_k) \times (\boldsymbol{a}_0\,\boldsymbol{a}_1\ \dots\ \boldsymbol{a}_k)^\intercal\right\|_2^2 .$$

Конфигурации $\hat{r}_1, \dots, \hat{r}_k$ называются новыми конфигурациями сходства и составляют новое метрическое описание. Таким образом, единственным существенным различием задач являются дополнительные метрические требования на новые метрические описания.

Необходимость свободного члена

Роль свободного члена в классическом МГК состоит не просто в снижении ошибки аппроксимации. Если свободный член в модели отсутствует, то возникают сложности с определением подходящей размерности многообразия, а главные компоненты существенно реагируют на направление на начало координат. В общем случае, при работе с признаковыми описаниями нет основания считать нулевое описание (начало координат) типичным представителем искомого многообразия и, следовательно, нецелесообразно пренебрегать свободным членом.

Однако при работе с метрическими описаниями возникает гипотеза, что свободный член не оказывает существенного влияния на результат факторизации. Действительно, нулевое метрическое описание можно считать типичным, поскольку оно соответствует парам совпадающих объектов.

Эксперименты на модельных наборах и реальных данных из [5] подтвердили, что наличие свободного члена в модели МГК практически не влияет на результаты применения МГК к метрическим описаниям.

Свойства МГК

Классический МГК завоевал свою популярность благодаря тому, что результаты его работы обладают рядом важных полезных свойств.

1. Решение задачи оптимизации известно в аналитическом виде. Нет необходимости применять численную оптимизацию и бороться с проблемами локальных оптимумов.
2. Решение в определённом смысле может быть получено сразу для всех размерностей аппроксимации. Главные компоненты упорядочиваются и оптимальным решением для любой размерности будет выбор первых компонент.
3. Главные компоненты ортонормированы. Это очень важно, поскольку позволяет построить

формулы перехода от старых описаний к новым без знания всех компонент. Можно вычислять не все главные компоненты.

4. Можно в ходе оптимизации вычислять лишь главные компоненты, после чего новые признаковые описания будут получены быстро и однозначно.
5. Есть вычислительно эффективные методы расчёта лишь нескольких первых компонент.
6. Новые признаки ортогональны. Это интерпретируется как декорреляция признаков. Можно быть уверенными в линейной независимости новых признаков.

В задаче метрического МГК введены дополнительные требования. Следовательно, можно опасаться, что качество аппроксимации упадёт, а решение утратит перечисленные свойства.

Последнее свойство 6 будет утрачено неминуемо. В [4] показано, что ортогональность несовместима с метрическими требованиями.

Основные результаты

Основной целью данной работы было исследование вопросов сохранения качества аппроксимации и свойств решения при наложении дополнительных метрических требований на результаты работы МГК.

Теорема 1. *Метрический МГК даёт ту же самую аппроксимацию исходных метрических описаний, что и классический МГК.*

Оказывается, дополнительные метрические условия никогда не препятствуют получению аппроксимации, даваемой МГК без ограничений. Сами новые метрические описания, как уже было сказано, будут отличаться, поскольку результат классического МГК ортогонален.

Следствие 1. *Качество аппроксимации не ухудшается.*

Теорема 2. *Решение, даваемое метрическим МГК, содержит те же самые главные компоненты* $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k$, *что и решение, даваемое классическим МГК.*

Следствие 2. *Свойства 3 и 5 сохраняются.*

Свойство 1 сохраняется. Вид решения известен, есть процедура прямого вычисления оптимального решения.

Свойство 2 практически сохраняется. Разница заключается в том, что если требуется пригодный для всех размерностей набор главных компонент $\boldsymbol{a}_0, \ldots, \boldsymbol{a}_n$, то придётся вычислить и все новые конфигурации сходства.

Свойство 4 сохраняется частично. В ходе оптимизации можно искать лишь главные компоненты. Новые конфигурации сходства можно получить потом и однозначно, однако процедура их получения требует больших вычислительных затрат.

Выводы

Хотя в задачу МГК были добавлены метрические требования, качество аппроксимации не ухудшилось, а из всех важных полезных свойств решения классического МГК было утрачено лишь то, которое было неминуемо утратить. Вычислительные затраты возросли.

Как и в классическом МГК, решение метрического МГК неоднозначно. Это позволяет исследовать возможность введения в задачу метрического МГК других дополнительных ограничений.

Автор благодарит Найденова Никиту Анатольевича, студента факультета ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова, за помощь в проведении экспериментов и подготовке текста публикации.

Литература

[1] *Jolliffe T.* Principal Component Analysis (2nd Ed.). — New York: Springer-Verlag Inc, 2002.

[2] *Майсурадзе А. И.* О поиске оптимального коллективного слагаемого для набора метрических конфигураций // Искусственный интеллект. — 2006. — № 2. — С. 146–150.

[3] *Майсурадзе А. И.* О оптимальных разложениях конечных метрических конфигураций в задачах распознавания образов // ЖВМ и МФ. — 2004. — Т. 44, № 9. — С. 1697–1707.

[4] *Майсурадзе А. И.* Гомогенные и ранговые базисы в пространствах метрических конфигураций // ЖВМ и МФ. — 2006. — Т. 46, № 2. — С. 344–361.

[5] *Местецкий Л. М., Бакина И.* Метод сравнения формы ладоней при наличии артефактов // Труды Всероссийской конференции «Математические методы распознавания образов (ММРО-14)», М.: МАКС Пресс, 2009.

Об одном классе корректных алгоритмов вычисления ΣΠ-оценок

Матросов В. Л., Шибзухов З. М.
szport@gmail.com
Москва, Московский Педагогический Государственный Университет

Рассматривается один класс корректных алгоритмов вычисления ΣΠ-оценок. Показано, что для определенного класса обучающих информаций в общем случае можно построить множество корректных алгоритмов вычисления ΣΠ-оценок при помощи прямой рекуррентной алгебраической процедуры обучения.

On a class of correct algorithms for computing ΣΠ-estimates

Matrosov V. L., Shibzoukhov Z. M.
Moscow, Moscow Pedagogical State University

A class of correct ΣΠ-estimates algorithms is considered. For some class of learning information it's shown that we can construct collections of correct ΣΠ-estimates algorithms with the help of direct recurrent algebraic learning procedure.

Среди различных моделей распознающих алгоритмов достаточно хорошо изучены и математически обоснованы модели алгоритмов вычисления оценок [2, 3]. В настоящей работе рассматривается модель алгоритмов вычисления оценок специального вида — модель вычисления ΣΠ-оценок. В этой модели удается строить множества распознающих алгоритмов, корректно функционирующих на заданной стандартной обучающей информации, при помощи прямой конструктивной алгебраической процедуры обучения, в которой автоматически строятся опорные множества и настраиваются параметры ΣΠ-оценок.

1. Пусть $\boldsymbol{S} = \{S\}$ — множество допустимых объектов, $\{x_i\colon \boldsymbol{S} \to \boldsymbol{V}_i\}$ — набор признаков, $i = 1,\ldots,n$, $\boldsymbol{V}_i$ — множество значений i-го признака. Таким образом, каждому объекту $S \in \boldsymbol{S}$ ставится его *исходное описание*

$$\boldsymbol{x}(S) = \big(x_1(S),\ldots,x_n(S)\big).$$

На каждом множестве $\boldsymbol{V}_i$ определена полуметрика $\rho_i(x,y)$ со свойствами:

— $\rho_i(x,x) = 0$;
— $\rho_i(x,y) > 0$ при $x \neq y$.

Положим по определению

$$\rho_i(S',S'') = \rho_i\big(x_i(S'),x_i(S'')\big).$$

Пусть для каждого объекта $S \in \boldsymbol{S}$ определен *информационный вектор*

$$\boldsymbol{\alpha}(S) = \big(\alpha_1(S),\ldots,\alpha_\ell(S)\big),$$

где $\alpha_j\colon \boldsymbol{S} \to \{0,1\}$ — характеристическая функция класса $K_j \subset \boldsymbol{S}$, $j = 1,\ldots,\ell$.

Будем считать, что выполняется следующее условие *непротиворечивости*.

Условие 1. Для любой пары различных объектов $S',S'' \in \boldsymbol{S}$ и для любого j

$$\alpha_j(S') \neq \alpha_j(S'') \Rightarrow \big(\exists i\colon \rho_i(S',S'') \neq 0\big).$$

2. Пусть задана *начальная информация*

$$I_0 = \big\{S_1,\ldots,S_m;\, \boldsymbol{\alpha}(S_1),\ldots,\boldsymbol{\alpha}(S_m)\big\},$$

где $\boldsymbol{S}^m = \{S_1,\ldots,S_m\} \subset \boldsymbol{S}$ — множество *эталонных* объектов,

Пусть задано множество *контрольных* объектов $\boldsymbol{S}^q = \{S^1,\ldots,S^q\} \subset \boldsymbol{S}$.

3. Алгоритм $\mathcal{A}$ вычисления оценок определяется как $\mathcal{A} = \mathcal{R} \circ \mathcal{C}$,

$$\mathcal{R}(I_0;S^1,\ldots,S^q) = \|\Gamma_{jk}\|_{m\times N} = \|\Gamma_j(S^k)\|_{m\times N},$$

$$\mathcal{C}\big(\|\Gamma_{jk}\|_{m\times N}\big) = \|\beta_{jk}\|_{m\times N},$$

$\mathcal{R}$ — распознающий оператор, $\mathcal{C}$ — решающее правило, $\Gamma_{jk} = \Gamma_j(S^k)$ — оценка S^k по классу K_j, $\beta_{jk} \in \{0,1\}$.

4. Пусть $\{\boldsymbol{i}\}$ — множество мультииндексов $\boldsymbol{i} \subseteq \{1,\ldots,n\}$ (опорные множества в терминологии [1]). Распознающему оператору $\mathcal{R}$ ставится в соответствие множество мультииндексов $\boldsymbol{I}(\mathcal{R})$.

5. Для каждой пары объектов $S',S'' \in \boldsymbol{S}$ и мультииндекса $\boldsymbol{i}$ в [1] вводится функция близости $\mathcal{B}_{\boldsymbol{i}}(S',S'')$, удовлетворяющая следующим условиям:

1) $0 \leqslant \mathcal{B}(S',S'';\boldsymbol{i}) = \mathcal{B}_{\boldsymbol{i}}(S'',S') \leqslant 1$;
2) если $\forall i \in \boldsymbol{i}\colon \rho_i(S',S'') = 0$ то $\mathcal{B}_{\boldsymbol{i}}(S',S'') = 1$.

Рассмотрим одно классическое определение $\mathcal{B}$. Пусть выбраны $\varepsilon_1 > 0,\ldots,\varepsilon_n > 0$. Обозначим

$$u_i(S',S'') = \begin{cases} 1, & \text{если } \rho_i(S',S'') \leqslant \varepsilon_i, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Тогда

$$\mathcal{B}(S',S'';\boldsymbol{i}) = \prod_{i\in\boldsymbol{i}} u_i(S',S'').$$

Для каждого i и ε_i обозначим

$$U_i(S') = \{S\colon u_i(S',S) = 1\}.$$

6. Классическая оценка $\Gamma(S;K)$ по конечному множеству $K \subset \boldsymbol{S}$ относительно множества мультииндексов $\boldsymbol{I} = \boldsymbol{I}(\mathrm{A})$ имеет вид:

$$\Gamma(S;K) = \frac{1}{Q} \sum_{S' \in K} \sum_{\boldsymbol{i} \in \boldsymbol{I}} \gamma(S') p(\boldsymbol{i}) \prod_{i \in \boldsymbol{i}} u_i(S, S'),$$

где Q — нормировочный множитель, $\gamma(S')$ — вес объекта S', $p(\boldsymbol{i})$ — вес мультииндекса $\boldsymbol{i}$.

Для каждого множества $\tilde{K}_j = K_j \cap \{S^1, \ldots, S^q\}$ и $\tilde{\tilde{K}}_j = \{S^1, \ldots, S^q\} \setminus K_j$ вводится оценка $\Gamma_j^1(\boldsymbol{x}) = \Gamma(S; \tilde{K}_j)$ и $\Gamma_j^0(S) = \Gamma(S; \tilde{\tilde{K}}_j)$, соответственно.

Полная классическая оценка для j-го класса имеет вид:

$$\Gamma_j(S) = \varkappa_1 \Gamma_j^1(S) + \varkappa_0 \Gamma_j^0(S),$$

где $\varkappa_0, \varkappa_1 \in \{0, 1\}$.

7. Для принятия решения используются решающие правила $\{\mathcal{C}_j\}$, при помощи которых определяется принадлежность объекта S классу K_j:

$$\mathcal{C}_j\big(\Gamma_1(S), \ldots, \Gamma_\ell(S)\big) = \begin{cases} 1, & \text{если } S \in K_j, \\ 0, & \text{если } S \notin K_j. \end{cases}$$

Самый простой вид решающих правил имеет вид:

$$\mathcal{C}_j(\Gamma_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } \Gamma_j \geqslant 0, \\ 0, & \text{если } \Gamma_j < 0. \end{cases}$$

Одно из широко распространенных решающих правил имеет вид:

$$\mathcal{C}_j^{\max}(\Gamma_1, \ldots, \Gamma_\ell) = \begin{cases} 1, & \text{если } \Gamma_j = \Gamma_{\max}, \\ 0, & \text{если } \Gamma_j < \Gamma_{\max}, \end{cases}$$

где $\Gamma_{\max} = \max\limits_{j=1,\ldots,\ell} \Gamma_j$.

8. Рассмотрим класс оценок следующего вида:

$$\Sigma\Pi(S) = \theta + \sum_{k=1}^{q} w_k \prod_{(i,p) \in \boldsymbol{i}\boldsymbol{p}_k} u_i(S, S_p), \qquad (1)$$

где θ — величина смещения, $\{w_k\}$ — набор весовых коэффициентов, $\{\boldsymbol{i}\boldsymbol{p}_k\}$ — набор множеств пар вида (i,p), $1 \leqslant i \leqslant n$, $1 \leqslant p \leqslant q$.

Оценку (1) будем называть ΣΠ-*оценкой* объекта S.

Построим множество $\boldsymbol{U} = \{\boldsymbol{u}_k\} \subset \{0,1\}^{nm}$, где

$$\boldsymbol{u}_k = \begin{pmatrix} u_1(S^k, S_1), & \ldots & u_n(S^k, S_1), \\ \ldots\ldots\ldots & \ldots & \ldots\ldots\ldots \\ u_1(S^k, S_m), & \ldots & u_n(S^k, S_m) \end{pmatrix}.$$

Набор $\boldsymbol{u}_k$ является *ε-спектром близости* объекта $S^k \in \boldsymbol{S}^q$ [3].

ΣΠ-оценку (1) можно записать в следующем виде:

$$\Sigma\Pi(\boldsymbol{u}) = \theta + \sum_{k=1}^{q} w_k \prod_{t \in \boldsymbol{t}_k} u_t, \qquad (2)$$

где $\boldsymbol{u} \in \{0,1\}^{nm}$, $\boldsymbol{t}_k \subseteq \{1, \ldots, nm\}$.

Предположим, что имеет место следующее условие о различии ε-спектров близости объектов из разных классов.

Условие 2. Для любой пары k' и k'' если существует $j\colon \alpha_j(S^{k'}) \neq \alpha_j(S^{k''})$, то найдется t: $u_{k't} \neq u_{k''t}$.

Данное условие эквивалентно условию разделимости объектов $\boldsymbol{S}^q$ при помощи покрытия: $\boldsymbol{S}^q \subseteq \{U_i(S_p)\}$.

Условие 3. Для любой пары объектов $S^{k'}$ и $S^{k''}$ если существует $j\colon \alpha_j(S^{k'}) \neq \alpha_j(S^{k''})$, то найдется пара i, p, такая, что

$$\text{либо } S^{k'} \in U_i(S_p) \wedge S^{k''} \notin U_i(S_p),$$
$$\text{либо } S^{k'} \notin U_i(S_p) \wedge S^{k''} \in U_i(S_p).$$

Если данное условие выполняется, то множество объектов $\boldsymbol{S}^q$ преобразуется во множество $\{\boldsymbol{u}_k\} \subseteq \{0,1\}^{nm}$, удовлетворяющее условию 2.

Таким образом, исходная задача распознавания свелась к задаче распознавания по двоичным признакам $\mathcal{Z}\big(\{\boldsymbol{u}_k\}, \{\boldsymbol{y}_k\}\big)$, $\boldsymbol{u}_k \in \{0,1\}^{nm}$, $\boldsymbol{y}_k \in \{0,1\}^{\ell}$. При этом выполняется условие непротиворечивости: для любой пары векторов $\boldsymbol{u}_{k'}$ и $\boldsymbol{u}_{k''}$ если найдется $j\colon y_{k'j} \neq y_{k''j}$, то найдется $t\colon u_{k't} \neq u_{k''t}$.

9. Рассмотрим некоторые свойства упорядоченных последовательностей двоичных векторов $\{\boldsymbol{u}_k\}$, необходимые для обоснования и применения конструктивной процедуры построения корректных ΣΠ-оценок.

Определим последовательности $\{\boldsymbol{u}_k\}$, *упорядоченные по нулям* относительно последовательности мультииндексов $\{\boldsymbol{t}_k\}$.

Определение 1. *Последовательность* $\{\boldsymbol{u}_k\}$ *упорядочена по нулям относительно* $\{\boldsymbol{t}_k\}$, *если*

$$\forall j < k \;\exists t \in \boldsymbol{t}_k\colon u_{jt} = 0 \wedge u_{kt} = 1. \qquad (3)$$

Последовательность $\{\boldsymbol{u}_k\}$ *упорядочена по нулям, если она упорядочена по нулям относительно* $\{\boldsymbol{t}_k^0\}$, *где* $\boldsymbol{t}_k^0 = \{t\colon u_{kt} = 1\}$.

Мультииндекс $\boldsymbol{t}_k$, удовлетворяющий условию (3), будем называть *допустимым*.

Пусть $\nu(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{u}) = \sum c_t u_t$, где $c_t > 0$. Тогда если упорядочить элементы множества $\{\boldsymbol{u}_k\}$ в порядке неубывания величины $\nu(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{u}_k)$, то получающаяся в результате последовательность $\{\boldsymbol{u}_k\}$ будет упорядочена по нулям.

На множестве последовательностей мультииндексов определим отношение $\sqsubset$ и $\sqsubseteq$.

Определение 2. $\{\boldsymbol{t}'_k\} \sqsubseteq \{\boldsymbol{t}''_k\}$, *если* $\forall k\colon \boldsymbol{t}'_k \subseteq \boldsymbol{t}''_k$.

Определение 3. $\{\boldsymbol{t}'_k\} \sqsubset \{\boldsymbol{t}''_k\}$, *если* $\{\boldsymbol{t}'_k\} \sqsubseteq \{\boldsymbol{t}''_k\}$ *и* $\exists k\colon \boldsymbol{t}'_k \subset \boldsymbol{t}''_k$.

Пусть задана последовательность $\{\boldsymbol{u}_k\}$, упорядоченная по нулям относительно $\{\boldsymbol{t}_k\}$.

Определение 4. *Последовательность* $\{\boldsymbol{t}_k\}$ *— минимальная относительно* $\{\boldsymbol{u}_k\}$, *если для любой другой* $\{\boldsymbol{t}'_k\} \sqsubset \{\boldsymbol{t}_k\}$ *последовательность* $\{\boldsymbol{u}_k\}$ *не является упорядоченной по нулям относительно* $\{\boldsymbol{t}'_k\}$.

10. Пусть $\{\boldsymbol{u}_k\}$ упорядочена по нулям относительно $\{\boldsymbol{t}_k\}$. Тогда легко показать, что последовательность функций $\{\mathrm{P}(\boldsymbol{u};\boldsymbol{t}_k)\}$, где

$$\mathrm{P}(\boldsymbol{u};\boldsymbol{t}) = \prod_{t\in\boldsymbol{t}} u_t,$$

удовлетворяет следующим требованиям:

1) $\forall j < k\colon \mathrm{P}(\boldsymbol{u}_j;\boldsymbol{t}_k) = 0$;
2) $\forall k\colon \mathrm{P}(\boldsymbol{u}_k;\boldsymbol{t}_k) = 1$.

То есть матрица $\{a_{kj}\}$, где $a_{kj} = \mathrm{P}(\boldsymbol{u}_j;\boldsymbol{t}_k)$, является треугольной с единичными элементами на главной диагонали.

Пусть $\{\boldsymbol{s}_k\} \subset \mathbb{R}^n$. Рассмотрим рекуррентную последовательность ΣΠ-оценок $\{\Sigma\Pi^k(\boldsymbol{u})\}$, где

$$\Sigma\Pi^k(\boldsymbol{u}) = \Sigma\Pi^{k-1}(\boldsymbol{u}) + w_k \mathrm{P}(\boldsymbol{u};\boldsymbol{t}_k), \qquad (4)$$

где $w_k = s_k - \Sigma\Pi^{k-1}(\boldsymbol{u}_k)$, а $\Sigma\Pi^0(\boldsymbol{u})$ — начальная ΣΠ-оценка (например, константа θ).

Лемма 1. *Для любой последовательности* $\{s_k\}$ *и любой последовательности* $\{\boldsymbol{u}_k\}$, *упорядоченной по нулям относительно* $\boldsymbol{t}_k$, *последовательность* $\{\Sigma\Pi^k(\boldsymbol{u})\}$, *построенная в соответствие с рекуррентным соотношением (4), удовлетворяет следующему условию:*

$$\forall k\, \forall j \leqslant k\colon \Sigma\Pi^k(\boldsymbol{u}_j) = s_j.$$

Обозначим $\Sigma\Pi_k\big(\{\boldsymbol{t}_k\}\big) = \Sigma\Pi^k(\boldsymbol{u})$ — оценку, построенную с использованием последовательности мультииндексов $\{\boldsymbol{t}_k\}$.

11. Для каждой последовательности $\{\boldsymbol{u}_k\}$, упорядоченной по нулям можно построить множество минимальных последовательностей мультииндексов $\{\boldsymbol{t}^\star_k\} \sqsubseteq \{\boldsymbol{t}^0_k\}$. Оно описывается при помощи последовательности $\{\boldsymbol{I}_k\}$, где $\boldsymbol{I}_k$ — множество всех минимальных допустимых мультииндексов $\boldsymbol{t}^\star_k \subseteq \boldsymbol{t}^0_k$. Таким образом множество всех минимальных последовательностей мультииндексов $\mathbb{I}\{\boldsymbol{u}_k\}$ состоит из последовательностей вида $\{\boldsymbol{t}^\star_k\}$, где $\boldsymbol{t}^\star_k \in \boldsymbol{I}_k$.

Определим множество ΣΠ-оценок, построенных на k-ом шаге при помощи минимальных мультииндексов:

$$\boldsymbol{\Sigma\Pi}_k = \bigcup_{\{\boldsymbol{t}^\star_k\}\in\mathbb{I}\{\boldsymbol{u}_k\}} \Sigma\Pi_k\big(\{\boldsymbol{t}^\star_k\}\big).$$

Для каждой последовательности $\{\boldsymbol{u}_k\}$, упорядоченной по нулям относительно $\{\boldsymbol{t}_k\}$, и последовательности $\{y_k\}$, где $y_k \in \{0,1\}$, можно построить ΣΠ-оценку $\Sigma\Pi(\boldsymbol{u})$ вида (2), такую что

$$\Sigma\Pi(\boldsymbol{u}_k) \geqslant 0 \Longleftrightarrow y_k = 1.$$

Конструктивный алгоритм прямого построения $\Sigma\Pi(\boldsymbol{u})$ изложен и обоснован в [4]. В общем случае по последовательности $\{\boldsymbol{u}_k\}$, упорядоченной по нулям строится непустой набор минимальных последовательностей мультииндексов $\{\boldsymbol{i}^\star_k\}$. Таким образом, если выполняется Условие 1, то верна следующая теорема.

Теорема 2. *Для каждого* $\tilde{K}_j$ *существует набор* ΣΠ*-оценок* $\{\Sigma\Pi^\ell_j(S)\}$ *вида* (1) *таких, что для всех* ℓ

$$\mathcal{C}_j\big(\Sigma\Pi^\ell_j(S)\big) = 1 \Longleftrightarrow S \in \tilde{K}_j.$$

12. Для каждой последовательности $\{\boldsymbol{u}_k\}$, упорядоченной по нулям относительно $\{\boldsymbol{t}_k\}$, и последовательности $\{\boldsymbol{y}_k\}$, где $\boldsymbol{y}_k \in \{0,1\}^m$, можно построить набор ΣΠ-оценок $\{\Sigma\Pi_j(\boldsymbol{u})\}$, такой, что

$$\Sigma\Pi_j(\boldsymbol{u}_k) \geqslant \max_\ell\{\Sigma\Pi_\ell(\boldsymbol{u}_k)\} \Longleftrightarrow y_{kj} = 1.$$

Конструктивный алгоритм прямого построения $\Sigma\Pi(\boldsymbol{u})$ также изложен и обоснован в [4]. Этот алгоритм позволяет построить набор, который включает в себя все такие алгоритмы вычисления ΣΠ-оценок.

Таким образом, если выполняется Условие 1, то верна следующая теорема.

Теорема 3. *Для набора классов* $\tilde{K}_j$ *существует множество наборов* ΣΠ*-оценок* $\{\Sigma\Pi_j(S)\}$ *вида (1), таких что*

$$\mathcal{C}^{\max}_j\big(\Sigma\Pi_1(S),\ldots,\Sigma\Pi_m(S)\big) = 1 \iff S \in K_j.$$

Указанные конструктивные процедуры обучения позволяют построить набор, который включает в себя все корректные алгоритмы вычисления ΣΠ-оценок.

Литература

[1] *Журавлев Ю. И.* Корректные алгебры над множествами некорректных (эвристических) алгоритмов. II. // Кибернетика. — 1977. — № 6. — С. 21–27.

[2] *Журавлев Ю. И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания и классификации // Избранные научные труды. — М.: Магистр, 1998. — С. 229–323.

[3] *Матросов В. Л.* Синтез оптимальных алгоритмов в алгебраических замыканиях моделей алгоритмов распознавания // Распознавание, классификация, прогноз. — М.: Наука, 1989. — С. 149–176.

[4] *Шибзухов З. М.* Конструктивные методы обучения ΣΠ-нейронных сетей — М.: МАИК Наука, 2006. — С. 159.

О сведении задачи распознавания к монотонному случаю

Махина Г. А.
gmakhina@yandex.ru
Симферополь, Таврический национальный университет им. В. И. Вернадского

В работе рассматривается сведение задачи распознавания образов с бинарными признаками к задаче минимизации монотонной частичной булевой функции.

On reducing a pattern recognition problem to the monotone case

Makhina G. A.
Tavrida National V. I. Vernadsky University, Simferopol, Ukraine

The reduction of the Pattern Recognition problem with Binary attributes to the problem of minimization of a partially defined Boolean function is considered in the paper.

Построение простейшего отделителя в задачах распознавания образов с бинарными признаками представляет собой по сути задачу минимизации дизъюнктивных нормальных форм (ДНФ) частичных булевых функций (ЧБФ). Если к тому же таблицы обучения содержат два класса объектов, соответствующих множествам единиц и нулей монотонной ЧБФ, то мы имеем дело с задачей минимизации монотонной ЧБФ. Примеры задач такого типа можно найти в работах [1–3]. Для задачи минимизации монотонных ЧБФ были разработаны эвристические приближенные алгоритмы, достаточно удобные для машинной реализации. К таким алгоритмам относится, например, алгоритм Акерса [4]. Ясно, что задача минимизации монотонных ЧБФ является частным случаем задачи минимизации произвольных ЧБФ. Однако возникает вопрос, возможно ли задачу минимизации произвольной функции свести к аналогичной задаче для монотонной функции. Целью настоящей работы является установление связи между данными задачами.

Справедлива следующая теорема.

Теорема 1. *Для любой ЧБФ $f(\tilde{x}^n)$ найдется монотонная ЧБФ $f'(\tilde{y}^{2n})$ такая, что между простыми импликантами функций f и f' существует взаимно-однозначное соответствие. Это соответствие порождает изоморфизм между тупиковыми ДНФ функций f и f' с сохранением сложности.*

Доказательство. Положим, что функция $f(\tilde{x}^n)$ задана множествами N_f и $N_{\bar{f}}$ своих единичных и нулевых наборов. Пусть функция $f'(\tilde{y}^{2n})$ такова, что множества $N_{f'}$ и $N_{\bar{f}'}$ получены из множеств N_f и $N_{\bar{f}}$ заменой каждого набора $(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ на набор $(\alpha_1, \bar{\alpha}_1, \ldots, \alpha_n, \bar{\alpha}_n)$. Назовем данное преобразование операцией расщепления.

Очевидно, что операция расщепления переводит все наборы множеств N_f и $N_{\bar{f}}$ в наборы, принадлежащие среднему слою куба B^{2n}, а значит полученная в результате функция $f'(\tilde{y}^{2n})$ является монотонной ЧБФ. Для всех наборов $\tilde{y}$ из $N_{f'} \cup N_{\bar{f}'}$ выполняется равенство

$$y_{2i-1} + y_{2i} = 1 \text{ при } i = 1, \ldots, n. \qquad (1)$$

Покажем, что между простыми импликантами функций f и f' существует взаимно однозначное соответствие.

Введем обозначение:

$$i_k^{\sigma_k} = \begin{cases} i_{2k-1}, & \text{если } \sigma_k = 1; \\ i_{2k}, & \text{если } \sigma_k = 0. \end{cases}$$

Определим соответствие $T\colon K^{n,r} \to K^{2n,r}$ между конъюнкциями $K^{n,r} = x_{i_1}^{\sigma_1} \,\&\, \cdots \,\&\, x_{i_r}^{\sigma_r}$ ранга r, заданными на кубе B^n, и конъюнкциями $K^{2n,r}$ ранга r куба B^{2n} следующим образом:

$$T(x_{i_1}^{\sigma_1} \,\&\, \cdots \,\&\, x_{i_r}^{\sigma_r}) = y_{i_1^{\sigma_1}} \,\&\, \cdots \,\&\, y_{i_r^{\sigma_r}}.$$

Покажем, что, если конъюнкция $K^{n,r} = x_{i_1}^{\sigma_1} \,\&\, \cdots \,\&\, x_{i_r}^{\sigma_r}$ является простой импликантой функции f, то конъюнкция $K^{2n,r} = T(K^{n,r})$ является простой импликантой монотонной ЧБФ f'. Для этого достаточно убедиться в том, что

1) $N_{K^{2n}} \cap N_{f'}$ не пусто;

2) $N_{K^{2n}} \cap N_{\bar{f}'}$ пусто;

3) импликанта K^{2n} функции f' является простой.

Пусть $K^n = x_{i_1}^{\sigma_1} \,\&\, \cdots \,\&\, x_{i_r}^{\sigma_r}$. Обозначим, конъюнкцию, полученную с помощью соответствия T через $K^{2n} = y_{i_1^{\sigma_1}} \,\&\, \cdots \,\&\, y_{i_r^{\sigma_r}}$. Все наборы куба B^n, на которых K^n принимает единичные значения, после расщепления дают наборы, у которых значения координат $y_{i_j^{\sigma_j}} = 1$ и $y_{i_j^{\bar{\sigma}_j}} = 0$ при $j = 1, \ldots, r$. Это значит, что конъюнкция K^{2n} на них выполняется, т. е. условие 1) выполняется.

Теперь убедимся в том, что $N_{K^{2n}} \cap N_{\bar{f}'} = \varnothing$. Очевидно, что для каждого набора из $N_{\bar{f}}$ существует, по крайней мере, одна координата с номером i_k $(1 \leqslant k \leqslant r)$ такая, что $x_{i_k}^{\sigma_k} = 0$, поскольку равенство $x_{i_j}^{\sigma_j} = 1$ одновременно для всех $j = 1, \ldots, r$ означает принадлежность к N_{K^n}, т. е. к N_f. Это значит,

что у каждого элемента $N_{\bar{f}'}$, полученного расщеплением наборов из $N_{\bar{f}}$, найдется такая пара координат с номерами $i_k^{\sigma_k}$ и $i_k^{\bar{\sigma}_k}$ $(1 \leqslant k \leqslant r)$, что $y_{i_k{}^{\sigma_k}} = 0$ и $y_{i_k{}^{\bar{\sigma}_k}} = 1$, т. е. конъюнкция K^{2n} не будет выполняться на таком наборе. Отсюда немедленно следует условие 2).

Предположим, что конъюнкция K^{2n} не является простой импликантой функции f'. Тогда K^{2n} содержит переменную, исключив которую, мы получим также допустимую для f' импликанту K'^{2n}. Не ограничивая общности, положим, что этой переменной является $y_{i_1^{\sigma_1}}$. Так как импликанта $K^n = x_{i_1}^{\sigma_1} \,\&\, \cdots \,\&\, x_{i_r}^{\sigma_r}$ является простой, то исключив из нее литеру $x_{i_1}^{\sigma_1}$, мы получим конъюнкцию, не являющуюся импликантой f, т. е. существует такой набор β^n из $N_{\bar{f}}$, для которого выполняется конъюнкция $x_{i_2}^{\sigma_2} \,\&\, \cdots \,\&\, x_{i_r}^{\sigma_r}$. После расщепления набор β^n перейдет в набор β'^{2n}, содержащий единицы в координатах $\{y_{i_j^{\sigma_j}}\}_{j=2}^r$. Значит, конъюнкция K'^{2n} на нем выполняется, т. е. K'^{2n} не является имликантой функции f', что противоречит предположению. Следовательно, условие 3) выполняется.

Теперь покажем, что каждой простой импликанте K^{2n} функции f' соответствует простая импликанта функции f.

Заметим, что для выполнения условия $N_{K^{2n}} \cap \cap N_g \neq \varnothing$ необходимо, чтобы простой импликант $N_{K^{2n}}$ не содержал одновременно двух переменных y_{2i-1} и y_{2i}, что следует из свойства (1). Поэтому каждой простой импликанте $N_{K^{2n}}$ монотонной ЧБФ f' можно однозначно поставить в соответствие конъюнкцию K^n куба B^n с помощью обратного преобразования T^{-1}, т. е. $K^n = T^{-1}(K^{2n})$.

Очевидно, что конъюнкция K^n выполняется для функции f, т. е. является ее импликантой. Предположим, что K^n не является простой импликантой функции f. Тогда исключением переменных из нее можно получить некоторую простую импликанту K^n_{prime}. Применив прямое преобразование T к K^n_{prime}, мы получим конъюнкцию, поглощающую K^{2n}, а это противоречит нашему условию, что K^{2n} является простой импликантой.

Изоморфизм между тупиковыми ДНФ функций f и f' вытекает непосредственно из изоморфизма между простыми импликантами и определения тупиковой ДНФ ЧБФ. А поскольку ранг конъюнкций, полученных в результате преобразования T, не изменяется, то отсюда также следует то, что сложности соответствующих тупиковых ДНФ функций f и f' совпадают.

Следствие 1. *Между минимальными ДНФ функции f и монотонной ЧБФ f', полученной с помощью операции расщепления переменных из функции f, существует взаимно однозначное соответствие.*

Как следует из [5], в общем случае число добавляемых переменных уменьшить нельзя.

Автор выражает признание проф. А. А. Сапоженко за постановку задачи и внимание к работе.

Литература

[1] *Рудаков К. В., Воронцов К. В.* О методах оптимизации и монотонной коррекции в алгебраическом подходе к проблеме распознавания // Докл. РАН. — 1999. — Т. 367, № 3. — С. 314–317.

[2] *Воронцов К. В.* Комбинаторный подход к оценке качества обучаемых алгоритмов // Матем. вопр. кибернетики.— 2004. — вып. 13. — С. 5-–36.

[3] *Boros E., Hammer P. L., Hooker J. N.* Predicting cause-effect relationships from incomplete discrete observations // SIAM Journal on Discrete Mathematics. — 1994. — N. 7. — Pp. 144–153.

[4] *Akers S. B.* A truth table method for synthesis of combinational logic // IRE Trans. — 1961. — Vol. EC-10, No. 4. — Pp. 604–615.

[5] *Сапоженко А. А., Караханян Л. М.* Об отрицательных эффектах, связанных с исключением несущественных переменных // АВТ. — 1981. — № 3. — С. 28–35.

О максимальном смещении эмпирического риска как оценки вероятности ошибочной классификации*

Неделько В. М.
nedelko@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики СО РАН

Работа посвящена проблеме оценивания риска в задаче классификации. Найдено максимальное смещение эмпирического риска для гистограммного классификатора. Получены простые приближённые формулы для данной величины.

On supreme bias of empirical risk being an estimate of misclassification probability*

Nedelko V. M.
Institute of Mathematics, Novosibirsk, Russia

This work is devoted to a problem of risk estimation in the classification task. The supreme bias of empirical risk being an estimate of misclassification probability was found for a histogramm classifier. Simplified expression for the bias was also obtained.

Гистограммный классификатор удобен для исследования тем, что позволяет делать аналитические выкладки, а также простотой метода классификации и отсутствием в методе каких-либо характеристик, учёт которых мог бы уточнить оценки [3, 5].

В работе [4] получено максимальное смещение эмпирического риска для гистограммного классификатора в асимптотическом случае.

В данной работе результат распространяется на случай конечных выборок. Приводится явный вид распределения, на котором достигается максимальное смещение эмпирического риска. При этом выводятся простые формулы, которые с достаточной точностью приближают искомые зависимости.

Постановка задачи

Пусть X — пространство значений переменных, используемых для прогноза, а $Y = \{0, 1\}$ — пространство значений прогнозируемых переменных, и пусть C — множество всех вероятностных мер на заданной σ-алгебре подмножеств множества $D = X \times Y$. При каждом $c \in C$ имеем вероятностное пространство $\langle D, B, \mathsf{P}_c\rangle$, где B — σ-алгебра, $\mathsf{P}_c[D]$ — вероятностная мера.

Решающей функцией называется соответствие $\lambda\colon X \to Y$.

Качество принятого решения оценивается заданной функцией потерь $\mathcal{L}\colon Y^2 \to [0, \infty)$. Под риском будем понимать средние потери:

$$R(c, \lambda) = \int_D \mathcal{L}\big(y, \lambda(x)\big)\, d\,\mathsf{P}_c[D].$$

В данной работе будем рассматривать самую простую и наиболее распространённую функцию потерь $\mathcal{L}(y, y') = \begin{cases} 0, & y{=}y'; \\ 1, & y{\neq}y'. \end{cases}$ В этом случае риск есть вероятность ошибочной классификации.

Пусть $V \in D^N$, $V = \big((x^i, y^i) \in D\big)$, $i = 1, \ldots, N$ — случайная независимая выборка из распределения $\mathsf{P}_c[D]$. Эмпирический риск определяется как средние потери на выборке:

$$\widetilde{R}(V, \lambda) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathcal{L}\big(y^i, \lambda(x^i)\big).$$

Пусть $Q\colon D^N \to \Lambda$ — метод (алгоритм) построения решающих функций, $\lambda_{Q,V}$ — функция, построенная по выборке V методом Q, Λ — заданный класс решающих функций.

Метод $\tilde{Q}$, минимизирующий эмпирический риск, есть $\lambda_{\tilde{Q},V} = \arg\min\limits_{\lambda \in \Lambda} \widetilde{R}(V, \lambda)$.

Смещением эмпирического риска является величина $S(c) = F(c) - \widetilde{F}(c)$, где $F(c) = \mathsf{E}R(c, \lambda_{Q,V})$, $\widetilde{F}(c) = \mathsf{E}\widetilde{R}(V, \lambda_{Q,V})$.

Задача нахождения максимального смещения эмпирического риска состоит в вычислении

$$\hat{S}(\widetilde{F}_0) = \max_{c\colon\, \widetilde{F}(c) = \widetilde{F}_0} S(c). \qquad (1)$$

Здесь нас интересует не безусловно максимальное значение смещения, а максимальное смещение при условии заданного значения ожидаемого эмпирического риска. Такая постановка объясняется тем, что на практике нас интересует значение риска при известном (полученном на исследуемой таблице данных) значении эмпирического риска.

Полезно рассмотреть также эквивалентную задачу, состоящую в нахождении

$$\hat{S}'(F_0) = \max_{c\colon\, \widetilde{F}(c) = F_0} S(c).$$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №10-01-00113-а.

Очевидно, что

$$\hat{S}(\widetilde{F}_0) = \hat{F}(\widetilde{F}_0) - \widetilde{F}_0, \quad \hat{S}'(F_0) = F_0 - \check{F}(F_0),$$

где

$$\hat{F}(\widetilde{F}_0) = \max_{c:\ \widetilde{F}(c)=\widetilde{F}_0} F(c), \quad \check{F}(F_0) = \min_{c:\ F(c)=F_0} \widetilde{F}(c).$$

Хотя практический интерес представляет именно $\hat{S}(\widetilde{F}_0)$, мы будем рассматривать также и $\hat{S}'(F_0)$, поскольку для неё будет получено простое приближённое выражение.

Заметим, что связь между этими функциями легко получить из тождества $\check{F}^{-1}(\widetilde{F}_0) = \hat{F}(\widetilde{F}_0)$ или $\hat{F}^{-1}(F_0) = \check{F}(F_0)$.

Гистограммный классификатор

Пусть X дискретно, то есть $X = \{1, \ldots, k\}$, и решающая функция минимизирует эмпирический риск независимо в каждой точке $x \in X$.

Тогда вероятностная мера $c \in C$ задается набором вероятностей

$$c = \{\zeta_j^\omega = \mathsf{P}(x = j,\, y = \omega)\},\ j = 1, \ldots, k,\ \omega \in \{1, 2\}.$$

Введём обозначения $\alpha_j = \mathsf{P}(x = j) = \zeta_j^1 + \zeta_j^2$, $p_j = \mathsf{P}(y = 1 \,|\, x = j)$, $q_j = 1 - p_j$, $c_j = (\alpha_j, p_j)$.

Для выборки V объема N пусть n_j — число точек выборки, для которых $x = j$, и m_j — число точек, для которых $x = j$ и $y = 1$. Таким образом, выборка в дискретном случае задается совокупностью пар $v_j = (m_j, n_j)$, т. е. $V = (v_j)$, $j = 1, \ldots, k$.

Описывая выборку, мы будем иногда для краткости говорить, что в «ячейке» j находится m_j точек первого и $n_j - m_j$ точек второго класса. Будем рассматривать алгоритм $\tilde{Q}$, который минимизирует эмпирический риск независимо в каждой точке пространства X, т. е. $\lambda_{\tilde{Q},V}(j) = 2$, при $n_j - m_j > m_j$, $\lambda_{\tilde{Q},V}(j) = 1$, при $n_j - m_j < m_j$, и $\lambda_{\tilde{Q},V}(j)$ принимает равновероятно значения 2 и 1, при $n_j - m_j = m_j$.

На выборках имеет место полиномиальное распределение $\mathsf{P}(V)$, суммируя по которому можно вычислять в том числе моменты различных функций выборки. Однако осуществлять перебор всех выборок — трудоёмкая в вычислительном плане процедура, поэтому непосредственное суммирование по выборкам осуществимо только для небольших N и k. При этом для аддитивных функций выборки вычисление моментов может быть произведено с полиномиальной трудоемкостью.

Вычисление моментов для аддитивных функций

Пусть $f(V) = \sum\limits_{j=1}^{k} \varphi(v_j, c_j) = \sum\limits_{j=1}^{k} \varphi(m_j, n_j, \alpha_j, p_j)$ — аддитивная функция выборки и распределения. Математическое ожидание $\mathsf{E}f(V) = \sum\limits_{j=1}^{k} \mathsf{E}\varphi(v_j, c_j)$ также аддитивно.

Обозначим $B(m, n, p) = \binom{n}{m} p^m (1-p)^{n-m}$ — биномиальное распределение.

Введём функцию $\mu_\varphi(c) = \mu_\varphi(\alpha, p) = \mathsf{E}\varphi(v, c)$. Легко получить, что

$$\mu_\varphi(\alpha, p) = \sum_{n=0}^{N} B(n, N, \alpha)\pi_\varphi(n, \alpha, p), \qquad (2)$$

где

$$\pi_\varphi(n, \alpha, p) = \sum_{m=0}^{n} B(m, n, p)\varphi(m, n, \alpha, p).$$

Окончательно, математическое ожидание есть

$$\mathsf{E}f(V) = \sum_{j=1}^{k} \mu_\varphi(c_j).$$

Для аддитивной $f(V)$ можно вычислить также дисперсию [6] [9].

Эмпирический риск и вероятность ошибочной классификации методом минимизации эмпирического риска являются аддитивными функциями, а именно:

$$\widetilde{R}(V) = \sum_{j=1}^{k} \tilde{r}(m_j, n_j),$$

$$\tilde{r}(m, n) = \frac{1}{N}\tilde{\nu}(m, n), \quad \tilde{\nu}(m, n) = \min(m, n - m);$$

$$R(c, \tilde{\lambda}_{Q,V}) = \sum_{j=1}^{k} r(m_j, n_j, \alpha_j, p_j),$$

$$r(m, n, \alpha, p) = \alpha\nu(m, n, p),$$

$$\nu(m, n, p) = \begin{cases} 1 - p, & m > n - m; \\ p, & m < n - m; \\ 0{,}5, & m = n - m. \end{cases}$$

Решение экстремальной задачи

Задача (1) в дискретном случае принимает вид:

$$\sum_{j=1}^{k} \mu_s(\alpha_j, p_j) \to \max_{\alpha_j, p_j}, \qquad (3)$$

при ограничениях

$$\sum_{j=1}^{k} \mu_{\tilde{r}}(\alpha_j, p_j) = \widetilde{F}_0, \ \sum_{j=1}^{k} \alpha_j = 1, \ 0 \leqslant p_j \leqslant 1.$$

Здесь $\mu_s(\alpha, p)$ и $\mu_{\tilde{r}}(\alpha, p)$ определяются по формуле (2) подстановкой вместо $\varphi(m, n, \alpha, p)$ функций $s(m, n, \alpha, p) = r(m, n, \alpha, p) - \tilde{r}(m, n, \alpha, p)$ и $\tilde{r}(m, n, \alpha, p)$ соответственно.

На рис. 1 приведены зависимости $k\mu_s$ от $k\mu_{\tilde{r}}$ для различных $k\alpha$ при $N = 20$, $k = 10$.

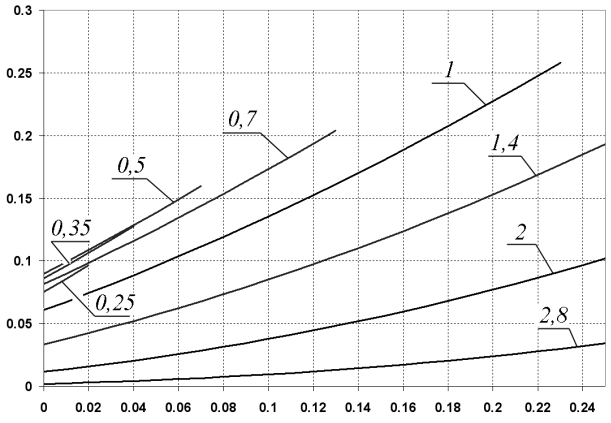


Рис. 1. Зависимость для риска в «ячейке».

Можно показать, что наибольшее смещение будет не более чем на $\frac{1}{k}$ отличаться от $k\hat{\mu}_s$, где $\hat{\mu}_s(z) = \max\limits_{\mu_{\tilde{r}}=z} \mu_s$ — огибающая кривых на графике.

Идея доказательства заключается в следующем.

Заметим, что отношение $\frac{\hat{\mu}_s(z)}{z}$ монотонно убывает с ростом z. Отсюда следует, что кривая $\hat{\mu}_s(\widetilde{F}_0)$ является решением экстремальной задачи (3) без ограничения $\sum_{j=1}^{k} \alpha_j = 1$. При этом максимальное смещение достигается, когда α_j равны, но их сумма может быть меньше 1.

Однако, чтобы обеспечить суммарное значение вероятностей, равное 1, достаточно всю недостающую вероятность поместить в одну «ячейку», положив также в этой «ячейке» $p_j = 0$, чтобы не изменить $\widetilde{F}$.

Поведение огибающей на рис. 1 является характерным при $N \geqslant k$. Начало огибающей соответствует изменению p от 0 до 0,5 при фиксированном $\alpha = \frac{1}{N}$. Продолжение огибающей соответствует изменению α от $\frac{1}{N}$ до $\frac{1}{k}$ при фиксированном $p = 0{,}5$.

В случае $N < k$ поведение кривых, и соответственно, решение ещё проще, но этот случай практически не интересен, поскольку выборка слишком мала для выбранной сложности классификатора. Поэтому в дальнейшем, если не оговорено противное, полагаем $N \geqslant k$.

Таким образом, распределение, на котором достигается значение смещения, не более, чем на $\frac{1}{k}$ отличающееся от максимального, имеет следующий вид:

$$\alpha_j = \alpha', \;\; p_j = p', \;\; j = 1, \ldots, k-1,$$
$$\alpha_k = 1 - \frac{k-1}{N}, \;\; p_k = 0.$$

Иными словами, «наихудшее» распределение является равномерным, за исключениям одной «ячейки», куда помещается «излишек» вероятности.

Значения α' и p' определяются следующим образом. При $\widetilde{F}_0 \leqslant \widetilde{F}_T$ имеем $\alpha' = \frac{1}{N}$, а p' вычисляется на основе $\widetilde{F}_0$. При $\widetilde{F}_0 \geqslant \widetilde{F}_T$ имеем $p' = 0{,}5$, а $\alpha' = \frac{1}{N}$ вычисляется на основе $\widetilde{F}_0$. Здесь $\widetilde{F}_T$ — математическое ожидание эмпирического риска при $\alpha' = \frac{1}{N}$, $p' = 0{,}5$.

Приближённые выражения

В формуле (2) Биномиальное распределение можно с хорошей точностью приблизить распределением Пуассона:

$$\mu_\varphi(\alpha, p) \approx \rho_\varphi(\gamma, p) = \sum_{n=0}^{N} \frac{\gamma^n}{n!} e^{-\gamma} \pi_\varphi(n, \alpha, p),$$

где $\gamma = N\alpha$.

Учитывая, что $\pi_{\tilde{r}}(n, \alpha, p) = \frac{1}{N}\pi_{\tilde{\nu}}(n, p)$ и $\pi_r(n, \alpha, p) = \alpha\pi_\nu(n, p)$ имеем

$$\rho_{\tilde{r}}(\gamma, p) = \frac{1}{N}\rho_{\tilde{\nu}}(\gamma, p);$$
$$\rho_r(\gamma, p) = \alpha\rho_\nu(\gamma, p) = \frac{\gamma}{N}\rho_\nu(\gamma, p).$$

Учитывая, что при «наихудшем» распределении c^* вероятности одинаковы во всех «ячейках», кроме последней, которая не даёт вклад в риски, имеем

$$\widetilde{F}(c^*) \approx \frac{k-1}{N}\rho_{\tilde{\nu}}(\gamma, p) \approx \frac{1}{M}\rho_{\tilde{\nu}}(\gamma, p),$$
$$F(c^*) \approx \frac{(k-1)\gamma}{N}\rho_\nu(\gamma, p) \approx \frac{\gamma}{M}\rho_\nu(\gamma, p),$$

где $M = \frac{N}{k}$ — среднее число выборочных точек на одну ячейку, т. е. относительный объём выборки.

Обозначим $\tilde{\rho}_1(p) = \rho_{\tilde{\nu}}(1, p)$ и $\tilde{\rho}_2(\gamma) = \rho_{\tilde{\nu}}(\gamma, \frac{1}{2})$.

Введём функцию

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_1(z), & 0 \leqslant z \leqslant \Upsilon; \\ \psi_2(z), & z \geqslant \Upsilon, \end{cases}$$

где $\Upsilon = \rho_{\tilde{\nu}}(1, \frac{1}{2}) \approx 0{,}163$, $\psi_1(z) = \rho_\nu\big(1, p^*(z)\big)$, $p^*(z) = \tilde{\rho}_1^{-1}(z)$, $\psi_2(z) = \gamma^*(z)\rho_\nu\big(\gamma^*(z), \frac{1}{2}\big) = \frac{1}{2}\gamma^*(z)$, $\gamma^*(z) = \tilde{\rho}_2^{-1}(z)$.

При $M \geqslant 1$ приближённое (с точностью до $\frac{1}{k}$ и замены Биномиального распределения распределением Пуассона) выражение для максимального смещения эмпирического риска есть

$$\hat{S}(\widetilde{F}_0) \approx \frac{1}{M}\psi'(M\widetilde{F}_0),$$

где $\psi'(z) = \psi(z) - z$. Данная функция определена для $\widetilde{F}_0$ при которых $\frac{1}{M}\psi(M\widetilde{F}_0) \leqslant 0{,}5$.

Заметим, что при различных M графики функций получаются друг из друга гомотетией.

На рис. 2 приведено максимальное смещение эмпирического риска в зависимости от относительного объёма выборки $M = \frac{N}{k}$.

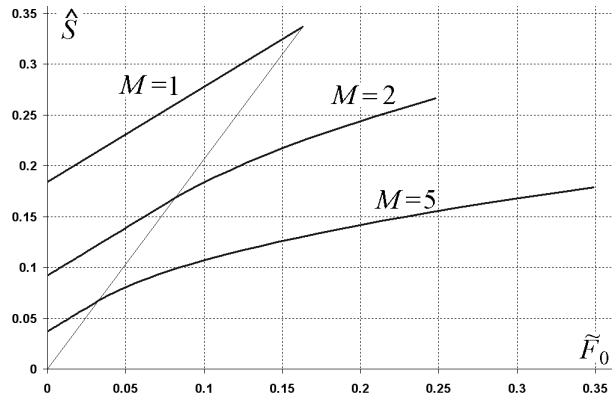


Рис. 2. Максимальное смещение эмпирического риска.

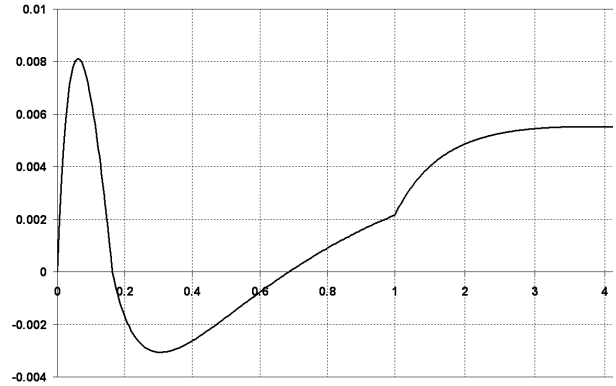


Рис. 3. Относительная погрешность $\Delta(z)$ оценки $\breve{\psi}(z)$ функции $\psi(z)$.

Функция $\psi(z)$ может быть с заданной точностью легко вычислена с помощью компьютера, однако её можно с достаточной для практических целей точностью приблизить простыми аналитическими выражениями.

На рис. 2 видно, что функция $\psi_1(z)$ на глаз не отличима от линейной. Легко убедиться, что $\psi_1(0) = \frac{1}{2e}$, а из определения Υ имеем $\psi_1(\Upsilon) = 0{,}5$. Отсюда получаем линейное приближение $\psi_1(z) \approx \breve{\psi}_1(z) = \frac{1}{2e} + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2e}\right)\frac{z}{\Upsilon}$.

Функцию, обратную к $\psi_2(z)$, также можно приблизить простым выражением. Оказывается, что для $\tilde{\rho}_2(\gamma)$ выполняется приближённое соотношение $1 - 2\frac{\tilde{\rho}_2(\gamma)}{\gamma} \approx \frac{1-2\Upsilon}{\sqrt{1+2\gamma}}\sqrt{3}$.

Учитывая, что $\psi_2(z) = 0{,}5\tilde{\rho}_2^{-1}(z)$, откуда $\psi_2^{-1}(\frac{\gamma}{2}) = \tilde{\rho}_2(\gamma)$, и заменяя $t = \frac{\gamma}{2}$, получаем $\psi_2^{-1}(t) \approx \breve{\psi}_2^{-1}(t) = t \cdot \left(1 - \frac{1-2\Upsilon}{\sqrt{1+4t}}\sqrt{3}\right),\ t \geqslant \frac{1}{2}$.

Чтобы получить приближение для $\psi_2(z)$, требуется обратить последнее выражение. В результате, комбинируя $\breve{\psi}_1(z)$ и $\breve{\psi}_2(z)$, получим приближение $\breve{\psi}(z)$ для $\psi(z)$.

Относительная погрешность $\Delta(z) = \frac{\breve{\psi}(z) - \psi(z)}{\psi(z)}$ данного приближения приведена на рис. 3.

Выводы

Найдено максимальное смещение эмпирического риска для гистограммного классификатора. Получены простые приближённые формулы для данной величины.

Установлено, что для гистограммного классификатора «наихудшее» распределение (для которого смещение эмпирического риска максимально) является смесью равномерного распределения и распределения, сосредоточенного в одной точке.

Подобного вида распределения легко могут быть заданы и в непрерывном пространстве переменных. Можно предположить, что на таких распределениях будет достигаться максимальное смещение эмпирического риска и для других (помимо гистограммного) методов классификации, что позволит, в частности, строить более точные эмпирические доверительные интервалы для риска [7].

Литература

[1] *Вапник В. Н., Червоненкис А. Я.* Теория распознавания образов. — Москва: Наука, 1974. — 415 с.

[2] *Лбов Г. С.* Выбор эффективной системы зависимых признаков // Выч. системы, вып. 19, Новосибирск, 1965. — С. 21–34.

[3] *Vorontsov K. V.* Combinatorial probability and the tightness of generalization bounds // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2008. — V. 18, N. 2. — Pp. 243–259.

[4] *Nedelko V. M.* Estimating a Quality of Decision Function by Empirical Risk // LNAI 2734. Machine Learning and Data Mining in Pattern Recognition. Third Intern. Conference, MLDM 2003. Proceedings. Leipzig: Springer-Verlag. — 2003. — Pp. 182–187.

[5] *Langford J.* Quantitatively tight sample complexity bounds. Carnegie Mellon Thesis. — 2002. — `http://citeseer.ist.psu.edu/langford02quantitatively.html`. — 130 p.

[6] *Braga–Neto U. and Dougherty E. R.* Exact performance of error estimators for discrete classifiers // Pattern Recognition, Elsevier Ltd. — 2005. — V. 38, N. 11. — Pp. 1799–1814.

[7] *Неделько В. М.* Об интервальном оценивании риска для решающей функции // Таврический вестник информатики и математики. Изд-во НАН Украины. — 2008. — № 2. — С. 97–103.

[8] *Неделько В. М.* О точности интервальных оценок вероятности ошибочной классификации, основанных на эмпирическом риске // Всеросс. конф. ММРО-14, М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 56–59.

[9] *Неделько В. М.* Оптимизация оценки вероятности ошибочной классификации в дискретном случае // Classification, Forecasting, Data Mining. Int. book series "Information Science and Computing", N. 8. Supplement to the Int. J. "Information Technologies and Knowledge", V. 3. ITA, FOI ITHEA, Sofia, 2009. — Pp. 47—54.

Инкрементные методы в коллаборативной фильтрации*

Полежаева Е. А.
lena_polejaeva@mail.ru
Москва, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет ВМК

В современных приложениях методов коллаборативной фильтрации исходные данные могут иметь большие объёмы (миллионы клиентов и объектов) и поступать в реальном масштабе времени. В этом случае важно требование инкрементности: метод должен эффективно пересчитывать оценки сходства как при появлении новых клиентов и объектов, так и при обновлении значений в матрице исходных данных. Предлагается метод, который не требует хранения матрицы исходных данных и объединяет в себе оба типа инкрементности, используя инкрементное сингулярное разложение (ISVD) и инкрементное вычисление корреляции Пирсона (IPC).

Incremental methods in collaborative filtering*

Polezhaeva E. A.
Moscow, Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics

In modern collaborative filtering applications initial data are typically very large (holding millions of users and items) and come in real time. In this case only incremental algorithms are practically useful. In this paper a new algorithm is proposed based on the symbiosis of Incremental Singular Value Decomposition (ISVD) and Incremental Pearson Correlation (IPC). The algorithm does not require to store the initial data matrix and effectively recalculates user/item profiles and similarity estimates when a new user or a new item appears or a data cell is modified.

Введение

Методы коллаборативной фильтрации (collaborative filtering, CF) используются в рекомендующих системах и системах управления взаимоотношениями с клиентами (CRM) для автоматического формирования персональных предложений. Исходными данными является матрица $Y = (y_{ur})_{n \times d}$, строки которой соответствуют n клиентам, столбцы — d объектам. В зависимости от приложения объектами могут быть товары, услуги, документы, и т. д. Каждая заполненная ячейка матрицы содержит информацию об использовании данным клиентом данного объекта. Это может быть отметка о посещении, выставленный клиентом рейтинг, сумма платежа, и т. д. Задача состоит в том, чтобы для произвольного клиента спрогнозировать оценки предпочтительности объектов по всем незаполненным ячейкам в строке матрицы Y. Предполагается, что для этого выделяется множество клиентов со схожими предпочтениями (коллаборация).

Простые методы CF, основанные на поиске корреляций между клиентами (user-based) или объектами (item-based), неэффективны по времени и по памяти, поскольку они требуют хранения всей матрицы Y. Этих недостатков лишены методы сингулярного разложения SVD [1], неотрицательного матричного разложения NNMF [2] и вероятностного латентного семантического анализа PLSA [3], позволяющие формировать сжатые описания (профили) клиентов и объектов. В современных динамических приложениях к методам CF предъявляется также требование *инкрементности*: метод должен эффективно пересчитывать хранимую информацию в случаях появления (1) нового клиента или объекта и (2) нового значения в ячейке матрицы Y. Обычно в работах по CF рассматривается только один из этих двух типов инкрементности. В данной работе предлагается объединить оба типа инкрементности, используя инкрементное сингулярное разложение (ISVD) и формулу инкрементного вычисления корреляции Пирсона (IPC) [4]. С помощью ISVD оцениваются профили клиентов, затем по этим профилям с помощью IPC вычисляются функции сходства клиентов. Выделяются клиенты, которые наиболее близки клиенту, для которого осуществляется поиск рекомендаций. Находятся наиболее популярные объекты для близких клиентов. Это позволяет отсортировать объекты по значениям рейтинга и выдать топ-список лучших объектов для рекомендации клиенту. В некоторых случаях, описанных ниже, вычисления могут производиться параллельно.

Инкрементное вычисление корреляции Пирсона (IPC)

В коллаборативной фильтрации корреляция Пирсона является одним из наиболее распространённых способов оценивания сходства $\mathrm{sim}(u, v)$ между клиентами u, v. Обычно матрица $Y = (y_{ur})$ является сильно разреженной, и для произвольного клиента u большинство элементов в строке пустые, $y_{ur} = \varnothing$, что обязательно должно учитываться при

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-07-00609.

вычислении корреляции Пирсона:

$$\mathrm{sim}(u,v) = \frac{\sum\limits_{r\in R_{uv}} (y_{ur} - \bar{y}_u)(y_{vr} - \bar{y}_v)}{\sqrt{\sum\limits_{r\in R_{uv}} (y_{ur} - \bar{y}_u)^2 \sum\limits_{r\in R_{uv}} (y_{vr} - \bar{y}_v)^2}}, \quad (1)$$

где $R_{uv} = \{r\colon y_{ur} \neq \varnothing,\ y_{vr} \neq \varnothing\}$ — подмножество объектов, которые оценили клиенты u и v, причём, как правило, $|R_{uv}| \ll d$; y_{ur} — рейтинг, данный клиентом u объекту r; $\bar{y}_u, \bar{y}_v$ — средние рейтинги клиентов u и v.

Когда клиент u добавляет новый рейтинг или изменяет имеющийся, должны изменяться и значения сходства между этим клиентом и остальными. Инкрементное вычисление корреляции Пирсона [4] основано на представлении (1) в виде функции от трёх переменных B, C, D, которые вычисляются аддитивно по элементам матрицы Y:

$$A = \mathrm{sim}(u,v) = B/\sqrt{CD};$$
$$B = \sum_{r\in R_{uv}} (y_{ur} - \bar{y}_u)(y_{vr} - \bar{y}_v);$$
$$C = \sum_{r\in R_{uv}} (y_{ur} - \bar{y}_u)^2; \quad D = \sum_{r\in R_{uv}} (y_{vr} - \bar{y}_v)^2.$$

Значения переменных A, B, C, D можно быстро пересчитать как после заполнения ранее пустой ячейки матрицы Y, так и после изменения значения ячейки, по общей формуле

$$A_{\mathrm{new}} = B_{\mathrm{new}}/\sqrt{C_{\mathrm{new}} D_{\mathrm{new}}};$$
$$B_{\mathrm{new}} = B + b; \quad C_{\mathrm{new}} = C + c; \quad D_{\mathrm{new}} = D + d;$$

где величины b, c, d, называемые *инкрементами*, вычисляются по-разному в случаях добавления и изменения ячейки. Рассмотрим эти случаи по отдельности.

Добавление нового рейтинга. Требуется найти сходство между клиентами u и v, когда клиент v добавляет новый рейтинг для объекта r. Возможны два случая:

— клиент u уже оценил r; тогда B, C, D изменяются в соответствии с $\bar{y}'_v$ — новым средним рейтингом v, добавленным рейтингом v для объекта r и новым количеством взаимно оцененных объектов клиентами u и v:

$$b = (y_{vr} - \bar{y}'_v)(y_{ur} - \bar{y}_u) - \sum_{r\in R_{uv}} \delta\bar{y}_v (y_{ur} - \bar{y}_u);$$
$$c = (y_{vr} - \bar{y}'_v)^2 + \sum_{r\in R_{uv}} \delta\bar{y}_v^2 - 2\sum_{r\in R_{uv}} \delta\bar{y}_v (y_{vr} - \bar{y}_v);$$
$$d = (y_{ur} - \bar{y}_u)^2,$$

где
$\bar{y}_u$, $\bar{y}_v$ — средний рейтинг клиентов u и v;
$\bar{y}'_v = \frac{y_{vr}}{m_v+1} + \frac{m_v}{m_v+1}\bar{y}_v$ — новое значение среднего рейтинга активного клиента v;
m_v — число объектов, оцененных клиентом v;
$\delta\bar{y}_v = \bar{y}'_v - \bar{y}_v$ — разность текущего и предыдущего значений среднего рейтинга клиента v;

— клиент u не оценивал r; тогда B, C изменяются в соответствии с новым средним рейтингом v (в этом случае формулы для инкрементов выписываются аналогично).

Изменение рейтинга. Требуется найти сходство между клиентами u и v, когда клиент v модифицирует рейтинг для объекта r. Возможны два случая:

— клиент u уже оценил r, тогда B, C изменяются в соответствии с новым средним рейтингом v и добавленным рейтингом v для объекта r;
— клиент u не оценивал r , тогда B, C изменяются в соответствии с новым средним рейтингом v.

Следующие величины требуется хранить и изменять при работе метода:

— B, C, D для всех пар клиентов u, v;
— m_u — количество объектов, оцененных каждым клиентом u;
— $\bar{y}_u$ — средний рейтинг для каждого клиента u;
— $\bar{y}'_v$ — новое значение среднего рейтинга активного клиента v:
$\bar{y}'_v = \frac{y_{vr}}{m_v+1} + \frac{m_v}{m_v+1}\bar{y}_v$ при добавлении рейтинга,
$\bar{y}'_v = \frac{\delta\bar{y}_v}{m_v} + \bar{y}_v$ при модификации рейтинга;
— $\delta\bar{y}_u = \bar{y}'_u - \bar{y}_u$ — разность текущего и предыдущего среднего значения рейтинга клиента u;
— $\sum\limits_{r\in R_{uv}} y_{ur}$, $\sum\limits_{r\in R_{uv}} y_{vr}$ — сумма рейтингов по объектам, оцененным каждой парой клиентов u, v.

Такое разбиение формулы на части при хранении промежуточных величин повышает эффективность вычисления оценок сходства клиентов и объектов. Важными являются следующие параметры: n' — число клиентов, с которыми данный клиент имеет хотя бы один общий объект, как правило, $n' \ll n$ ($n' > 0$ — условие, позволяющее оценивать сходство); d' — число объектов, не оцененных данным клиентом, но оцененных по крайней мере одним из близких к нему клиентов, как правило, $d' \ll d$ ($d' > 0$ — условие того, что хотя бы один объект может быть рекомендован данному клиенту).

Метод не требует хранения всей матрицы Y. Модификация ячейки матрицы Y требует $O(n'd')$ операций для поддержания матрицы сходств клиентов (не более, чем n' сходств надо модифицировать, и не больше, чем d' объектов просмотреть для формирования рекомендаций клиенту). Для сравнения, в классическом методе CF сложность вычислений будет порядка n^2, так как надо дважды в цикле «обойти» всех клиентов (рассмотреть все пары клиентов), и потом еще объекты, оцененные обоими клиентами.

Инкрементное сингулярное разложение (ISVD)

Второй подход связан с сингулярным разложением, которое позволяет представить матрицу Y в виде произведения двух ортогональных матриц U и R и диагональной матрицы S, так что верны равенства $USR^\intercal = Y,\ U^\intercal YR = S$. Диагональные элементы S называются сингулярными числами, а столбцы U и R — левыми и правыми сингулярными векторами, соответственно. Оставим только r наибольших сингулярных чисел в S, у U и R оставим только столбцы, отвечающие этим сингулярным числам. Результат после прореживания матриц $U'S'R'^\intercal \approx Y$ есть наилучшая аппроксимация ранга r матрицы Y в смысле наименьших квадратов. Нас будет интересовать именно такое разложение.

Постановка задачи

Рассмотрим такие случаи модификации данных, добавления и удаления строк и столбцов к матрице Y, при которых происходит изменение её ранга на 1. Пусть есть два вектор-столбца a и b и известное SVD $USR^T = Y$. Требуется найти SVD матрицы $Y + ab^T$. Бинарный вектор b определяет, какие столбцы должны быть модифицированы, а вектор a определяет, что требуется получить: добавить или удалить значения, либо модифицировать значения в выбранных строках и столбцах.

Например, добавление столбца можно описать так: $US[R^\intercal\ \ 0] = [Y\ \ 0]$ — известное разложение, $U'S'R'^\intercal = [Y\ \ c]$ — требуемое разложение, $a = c$, $b = [0, \ldots, 0, 1]^\intercal$.

Пусть $USR^\intercal = Y$ есть SVD ранга r матрицы $Y_{n\times d}$, у которой большинство элементов пустые, где $U^\intercal U = R^\intercal R = I$. Покажем, как модифицировать U, S, R в более общем случае, чтобы получить SVD $Y + AB^\intercal$, где A и B имеют c столбцов ($A_{n\times c}$,$B_{d\times c}$).

Получение нового SVD

Нас интересует SVD [1]:

$$Y + AB^\intercal = [U, A] \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} [R, B]^\intercal \qquad (2)$$

Пусть P — ортогональный базис пространства столбцов $\tilde{A} = (I - UU^\intercal)A = A - UU^\intercal A$. Применим QR-разложение к $\tilde{A}$: $\tilde{A} = PR_A$, где P — ортонормированная, а R_A — верхняя треугольная матрица, $R_A = P^\intercal(I - UU^\intercal)A$.

Итак, запишем QR-разложение матрицы $[U, A]$:

$$[U, P] \begin{bmatrix} I & U^\intercal A \\ 0 & R_A \end{bmatrix} = [U, A] \qquad (3)$$

Разложение может быть эффективно вычислено, в частности, с помощью модифицированной ортогонализации Грама–Шмидта [5].

Аналогично, пусть Q — ортогональный базис пространства столбцов $B - RR^\intercal B$, тогда $QR_B = (I - RR^\intercal)B$, где Q — ортонормированная, а R_B — верхняя треугольная матрица, $R_B = Q^\intercal(I - RR^\intercal)B$.

Представим матрицу $Y + AB^\intercal$ в виде произведения трёх матриц:

$$\begin{aligned} Y + AB^\intercal &= \\ &= [U, A] \begin{bmatrix} I & U^\intercal A \\ 0 & R_A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & R^\intercal B \\ 0 & R_B \end{bmatrix} [R, Q]^\intercal \\ &= [U, P] \Bigg(\underbrace{\begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} U^\intercal A \\ R_A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R^\intercal B \\ R_B \end{bmatrix}^\intercal}_{K} \Bigg) [R, Q]^\intercal; \end{aligned}$$

$$K = \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (U^\intercal A)(B^\intercal R) & (U^\intercal A)R_B^\intercal \\ R_A(B^\intercal R) & R_A R_B^\intercal \end{bmatrix}.$$

Пусть $U'S'R'^\intercal$ — SVD ранга $(r + c)$ матрицы K. Диагонализируя K, $U'^\intercal K R' = S'$, получаем новые матрицы U', S', R'. Тогда модификация SVD ранга r до ранга $(r + c)$ выглядит так:

$$Y + AB^\intercal = \big([U\ P]U'\big)S'\big([R\ Q]R'\big)^\intercal. \qquad (4)$$

Однако, вместо того, чтобы оперировать с матрицами больших размеров, вводится SVD разложение матрицы $Y + AB^\intercal$, состоящее из пяти матриц:

$$U_{n\times r}U'_{r\times r}S_{r\times r}R'^\intercal_{r\times r}R^\intercal_{r\times d} \qquad (5)$$

где UU', RR', U, U' — ортонормированные матрицы, U' и R' — матрицы, позволяющие сохранять диагональность S, поэтому вычисления производятся быстро.

Если добавляется одна строка или столбец, то модификации можно производить следующим образом: для измененного SVD (a — вектор размерности n, b — вектор размерности d) используем модифицированную ортогонализацию Грама–Шмидта:

$$\begin{aligned} z &= U^\intercal a; & p &= a - Uz; \\ w &= R^\intercal b; & q &= b - Rw; \end{aligned}$$

Тогда верно:

$$K = \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} zw^\intercal & z\|q\| \\ \|p\|w^\intercal & \|p\|\|q\| \end{bmatrix}.$$

Матрица K имеет очень простой вид, что обуславливает возможность ее эффективной по времени диагонализации и получения нового SVD. После получения нового SVD к матрице US применяется формула инкрементного вычисления корреляции Пирсона, и находится сходство между клиентами. При добавлении объекта такой процесс последователен и требует $O((nd + d)r)$ операций, но добавление клиента позволяет использовать параллельные вычисления.

Алгоритм 1. Совместный ISVD и IPC.

Вход: $Y \in \mathbb{R}^{n\times d}$; $a \in \mathbb{R}^n$; $b \in \mathbb{R}^d$;
Выход: p_{ur};

1: **если** модификация одной ячейки матрицы **то**
2: используем IPC для Y, сохраняем в массив $\delta y_{ij} = y'_{ij} - y_{ij}$ (разность текущего и предыдущего значения при изменении одной ячейки матрицы Y) , при этом возможно параллельно с IPC найти SVD с помощью ISVD;
3: **иначе если** новый клиент **то**
4: $u_{\text{new}} = y_{\text{new}} RS^{-1}$. Находим $\text{sim}(u, v)$ для US, при этом возможно параллельно найти SVD с помощью ISVD;
5: **иначе если** новый объект **то**
6: Применяем ISVD к матрице Y, затем находим $\text{sim}(u, v)$ для $UU'S$;
7: Применяем (6).

ISVD при добавлении клиента

При добавлении нового клиента возможно улучшение по времени: эффективное вычисление новой строки матрицы U, отвечающей добавленному клиенту, позволяет применять формулу вычисления корреляции Пирсона для US параллельно с получением ISVD. Используя результаты [6], можно при добавлении нового клиента u быстро найти новую строку для матрицы U, характеризующую данного нового клиента, зная только вектор рейтингов объектов клиентом u (новую строку Y), а также матрицы предыдущего разложения SVD:

$$u_{\text{new}} = y_{\text{new}} RS^{-1},$$

где u_{new} — новая вектор-строка матрицы U, y_{new} — вектор рейтингов нового клиента (новая строка в матрице Y). Таким образом, имея новое U, можем найти сходство клиентов через профили, применяя IPC к US, а параллельно находить новое SVD. В результате добавление клиента требует $O((nd + n)r)$ операций.

Общий алгоритм ISVD и IPC

Для того, чтобы дать новый топ-список рекомендуемых объектов для клиента, будем использовать функцию сходства клиентов, основанное на ISVD и IPC. Чтобы выделить топ-список объектов, будем использовать значение средней абсолютной ошибки (MAE — Mean Absolute Error):

$$p_{ur} = \bar{y}_u + \frac{\sum\limits_{v\in U} \text{sim}(u, v)(y_{vr} - \bar{y}'_u)}{\sum\limits_{v\in U} \text{sim}(u, v)}. \qquad (6)$$

Далее сортируем объекты по значениям рейтинга и получаем топ-список объектов.

Приведенные выше рассуждения приводят к алгоритму совместного инкрементного сингулярного разложения (ISVD) и инкрементного вычисления корреляции Пирсона (IPC). Псевдокод приведён в Алгоритме 1.

Выводы

Предложен метод, позволяющий эффективно хранить информацию, а также эффективно находить рекомендации для клиентов через оценку их сходства, используя икрементное вычисление корреляции Пирсона и инкрементное сингулярное разложение. При этом объем хранимых данных в случае исходной матрицы Y размера $n \times d$ ранга r составляет $O(n + kn' + (n + d)r)$, где n' — число клиентов, с которыми данный клиент имеет хотя бы один общий объект (обычно $n' \ll n$); k — число клиентов, имеющих хотя бы с одним другим клиентом общий объект. Добавление клиента требует $O((nd + n)r)$ операций, добавление объекта — $O((nd + d)r)$ операций, модификация ячейки матрицы Y — $O(n'd')$ операций.

В будущем предполагается разработать и исследовать модификацию инкрементного метода, позволяющую работать с сильно разреженными матрицами.

Литература

[1] *Brand M.* Fast Low-rank modifications of the thin singular value decomposition // Linear Algebra and Its Applications. — 2006. — Т. 415, № 1. — С. 20–30.

[2] *Lee D.D., Seung H.S.* Learning the parts of objects by nonnegative matrix factorization // Nature. — 1999. — Т. 401(6755), — С. 788–791.

[3] *Leksin V.A.* Symmetrization and overfitting in probabilistic latent semantic analysis // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Т. 19, № 4. — С. 565-574.

[4] *Papagelis M.* Incremental collaborative filtering for highly-scalable recommendation algorithms // ISMIS, Springer. — 2005. — Т. 3488, — С. 553-561.

[5] *Golub G.* Matrix Computations. — Johns Hopkins University Press, 1996. — 728 с.

[6] *Furnas G.* Information retrieval using a singular value decomposition model of latent semantic structure // In Proc. ACM SIGIR Conf, 1988. — С. 465–480.

О задачах классификации значений признаков в задачах классификации*

Рудаков К. В.
rudakov@ccas.ru
Москва, Вычислительный центр РАН

Предлагается взгляд на значения признаков объектов в задачах обучения по прецедентам как на объекты в соответствующей «двойственной» задаче классификации, в которой требуется выделить в множестве значений всех признаков подкласс «информативных». Обсуждаются некоторые комбинаторные и метрические аспекты указанной «двойственной» задачи.

On the features' values classification in the classification problems*

Rudakov K. V.
Moscow, Computing Center RAS

Here, it is proposed to consider the values of the features of objects involved in training on sets of precedents as objects in the corresponding "dual" problem of the classification. The latter problem requires finding in the set of features' values a subset of the "most informative" ones. We discuss some combinatorial and metric aspects of this "dual" problem.

Основная идея может быть продемонстрирована на стандартной постановке задачи классификации: дан набор объектов, описанных значениями некоторых признаков; для этих объектов дана информация о их принадлежности к заданному набору классов; описаны дополнительные к прецедентным условия, которым должно удовлетворять отображение, реализуемое искомым (корректным) алгоритмом; требуется — построить корректный алгоритм. Достаточно часто встречается ситуация, когда только некоторые из значений признаков действительно влияют на результат классификации объектов. Остальные значения при этом представляется разумным объявлять неопределенными, сводя задачу к случаю частично определенных признаков. Описанная ситуация имеет место, в частности, в задаче распознавания вторичной структуры белков, в которой значениями признаков считаются некоторые слова в 20-буквенном алфавите [1, 2].

В анонсируемом докладе обсуждаются методы анализа множества значений признаков для оценивания их «групповой информативности и полноты» и их классификации (отбора подмножества значений, реально влияющих на классификацию объектов в исходной задаче). Эти методы основаны на рассмотрении значений признаков как «двойственных» объектов, имеющих как исходное описание, так и описание в виде подмножеств объектов изучаемой выборки и подмножеств декартовых произведений подвыборок объектов из попарно различных классов. Теоретико-множественные описания значений признаков дают возможность получать критерии полноты отбираемых групп (что приводит к задачам поиска покрытий и порождает дополнительные универсальные симметрические ограничения), использовать векторные оценки «информативности» отдельных значений и применять метрические конструкции и методы, в частности, метрики Хемминга и Фреше-Никодима. Существенная особенность возникающих задач возникает также в силу того, что на множествах значений некоторых признаков имеются «естественные» факторизации (например, для действительнозначного признака это может быть переход к «интервальным» значениям). Соответствующие проблемы связаны, в том числе, с анализом комбинаторных оценок обобщающей способности.

На любой конечной выборке объектов каждый признак принимает конечное множество значений, так что любое такое значение можно рассматривать как отдельный предикат. Такое тривиальное сведение к задаче с булевыми признаками позволяет, естественно, применять технику тестов и представительных наборов, но число булевых признаков при этом может катастрофически возрастать и, кроме того, эти признаки оказываются взаимно зависимыми. Поэтому более перспективным представляется проведение анализа систем подмножеств исследуемой выборки прецедентов, определяемых подмножествами («интервалами») значений отдельных признаков и групп («опорных множеств») признаков. При таком анализе совместно значимы как индивидуальные характеристики отдельных значений признаков и их групп (типа мощности соответствующих подмножеств выборки и декартовых произведений подвыборок объектов из попарно различных классов), так и «взаимная дополнительность» значений признаков, классифицируемых как «информативные». Мощност-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 09-07-12098, 09-07-00212-а и 09-07-00211-а.

ные характеристики очевидным образом предполагают использование техники синтеза алгоритмов с контролируемой обобщающей способностью, разработанной К. В. Воронцовым [3].

Методы метрического анализа пространства значений признаков имеют существенные особенности по сравнению с обычными задачами классификации. В отличие от «нормального» представления о классе как о «компактном» подмножестве сходных объектов, здесь приходится искать класс «информативных значений признаков» как подмножество «информативных» по отдельности значений, обеспечивающее максимальное покрытие декартовых произведений подвыборок объектов из попарно различных классов. В некотором смысле эта задача оказывается родственной к построению (тупиковых, минимальных) ε-сетей для конечных метрических пространств. Отметим, наконец, что в случаях наличия мер близости или метрик на пространствах значений отдельных признаков существенный интерес представляют результаты анализа «согласованности» этих характеристик и оценок расстояний, получаемых на основе описаний значений признаков подвыборками прецедентов.

Литература

[1] *Рудаков К. В., Торшин И. Ю.* Вопросы разрешимости задачи распознавания вторичной структуры белка // Информатика и её применения. — 2010. — Т. 4, № 2. — С. 25–35.

[2] *Торшин И. Ю.* Анализ мотивов в задаче распознавания вторичной структуры белка на основе критерия разрешимости // Международная конференция «Интеллектуализация обработки информации» ИОИ-8, Кипр, Пафос, 2010. — С. **??**–**??**.

[3] *Воронцов К. В.* Точные оценки вероятности переобучения // Доклады РАН. — 2009. — Т. 429, № 1. — С. 15–18.

Вероятность переобучения плотных и разреженных семейств алгоритмов*

Толстихин И. О.
iliya.tolstikhin@gmail.com
Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН

Показано, что для оценивания вероятности переобучения семейств алгоритмов, обладающих свойствами расслоения и связности, достаточно брать их подмножества, состоящие из небольшого числа существенно различных алгоритмов с малым числом ошибок.

The probability of overfitting for the compact and sparse sets of predictors*

Tolstikhin I. O.
Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russia

We show that if a set of classifiers possesses the properties of splitting and similarity, then its probability of overfitting can be approximated by a small subset of essentially different classifiers with low error rate.

Оценивание вероятности переобучения — одна из основных задач теории статистического обучения [2]. Чем точнее её решение, тем больше возможностей открывается для создания алгоритмов машинного обучения с гарантированно высокой способностью к обобщению эмпирических данных.

Большинство известных верхних оценок вероятности переобучения представляют собой произведение двух сомножителей. Первый описывает сложность семейства алгоритмов. Например, в VC-оценках [1] это *коэффициент разнообразия* (shattering coefficient), равный числу алгоритмов семейства, различимых на заданной конечной выборке длины L. Второй сомножитель — это вероятность большого уклонения частот ошибок в двух непересекающихся подвыборках длины $L/2$ для одного отдельно взятого алгоритма. Обычно она оценивается сверху неравенствами Хёффдинга, Чернова, или другими оценками скорости сходимости в законе больших чисел или его обобщениях [2].

В комбинаторном подходе [5, 6] рассматривается *генеральная выборка* длины L и предполагается равновероятность всех её разбиений на две подвыборки — наблюдаемую *обучающую* длины ℓ и скрытую *контрольную* длины $k = L - \ell$. В этом случае второй сомножитель определяется точно, через гипергеометрическое распределение.

Первый сомножитель сильно завышен в большинстве известных оценок. Степень его завышенности измерялась в экспериментах на реальных задачах классификации [4]. Для этого вероятность переобучения оценивалась методом скользящего контроля. Поделив её на второй сомножитель, который известен точно, можно получить *эффективный локальный коэффициент разнообразия* (ЭЛКР). Он показывает, каким должен был бы быть первый сомножитель, чтобы оценка не была завышенной. Он также интерпретируется как число алгоритмов, «эффективно используемых» при решении данной конкретной задачи, то есть имеющих высокую вероятность быть выбранными в результате обучения. В экспериментах [4] ЭЛКР принимал значения порядка 10^0–10^1 при коэффициентах разнообразия порядка 10^6–10^9. Ни одна из известных теорий не могла объяснить столь низких значений ЭЛКР. В данной работе делается попытка дать такое объяснение.

В последующих работах [5, 6] было показано, что завышенность VC-оценок возможно устранить только путём одновременного учёта двух эффектов, наблюдаемых при решении реальных задач.

Эффект расслоения связан с тем, что при фиксации задачи семейство алгоритмов расслаивается по числу ошибок на генеральной выборке. Чем выше слой, тем меньше вероятность, что в результате обучения будет выбран алгоритм из этого слоя. Как правило, в нижних слоях находится ничтожно малая доля алгоритмов, однако именно они «эффективно используются» в данной задаче.

Эффект связности возникает в семействах алгоритмов, непрерывных по параметрам. В этом случае для каждого алгоритма в семействе найдётся некоторое число алгоритмов, различимых с ним только на одном каком-то объекте генеральной выборки. Будем называть такие алгоритмы связанными. Похожие (в частности, связанные) алгоритмы вносят меньший вклад в вероятность переобучения, чем непохожие. Поэтому увеличение связности способствует снижению переобучения.

Понимание этих эффектов позволяет выдвинуть следующую гипотезу: *вероятность переобучения расслоенного и связного множества алго-*

Работа поддержана РФФИ (проект №08-07-00422) и программой ОМН РАН «Алгебраические и комбинаторные методы математической кибернетики и информационные системы нового поколения».

ритмов может быть аппроксимирована вероятностью переобучения его подмножества, состоящего из существенно различных алгоритмов нижних слоёв. При этом малые значения ЭЛКР, наблюдавшиеся в экспериментах, позволяют надеяться, что для аппроксимации хватит нескольких десятков алгоритмов. В данной работе исследуется возможность аппроксимации «плотных» семейств алгоритмов их «разреженными» подсемействами.

Понятие вероятности переобучения

Задано множество объектов $\mathbb{X} = \{x_1, \dots, x_L\}$, множество алгоритмов $A = \{a_1, \dots a_D\}$ и бинарная функция $I\colon \mathbb{X} \times A \to \{0, 1\}$, называемая *индикатором ошибки*, такая, что $I(a, x) = 1$ тогда и только тогда, когда алгоритм a ошибается на объекте x.

Каждому алгоритму соответствует бинарный *вектор ошибок* $\big(I(a, x_i)\big)_{i=1}^{L}$ длины L. *Матрицей ошибок* называется $D \times L$-матрица, строками которой являются векторы ошибок алгоритмов из A. В дальнейшем будем считать, что строки матрицы ошибок попарно различны, и отождествлять алгоритмы с их векторами ошибок.

Числом ошибок алгоритма a на выборке $X \subseteq \mathbb{X}$ называется величина $n(a, X) = \sum\limits_{x \in X} I(a, x)$.

Частотой ошибок (или *эмпирическим риском*) алгоритма a на выборке $X \subseteq \mathbb{X}$ называется величина $\nu(a, X) = \frac{1}{|X|} n(a, X)$.

Обозначим через $[\mathbb{X}]^\ell$ множество всех C_L^ℓ подмножеств $X \subseteq \mathbb{X}$ мощности ℓ.

Методом обучения называется отображение $\mu\colon [\mathbb{X}]^\ell \to A$, которое произвольной выборке X длины ℓ ставит в соответствие некоторый алгоритм.

Метод обучения μ называется методом *минимизации эмпирического риска* (МЭР), если

$$\mu X \in A(X) \equiv \operatorname{Arg}\min_{a \in A} n(a, X).$$

В случае $|A(X)| > 1$ выбор алгоритма из $A(X)$ неоднозначен. Метод МЭР называется *пессимистическим* (ПМЭР), если

$$\mu X \in \operatorname{Arg}\max_{a \in A(X)} n(a, \mathbb{X}\backslash X).$$

Метод МЭР называется *рандомизированным* (РМЭР), если он выбирает произвольный алгоритм из $A(X)$ случайно и равновероятно [3].

Величина $\delta_\mu(X) = \nu\left(\mu X, \mathbb{X}\backslash X\right) - \nu\left(\mu X, X\right)$ называется *переобученностью* метода μ на выборке X. Если $\delta_\mu(X) \geqslant \varepsilon$, где ε — фиксированный *порог переобучения*, то говорят, что *метод μ переобучен на выборке X*.

Следуя комбинаторному подходу [4, 5, 6], будем полагать, что при фиксированном ℓ все C_L^ℓ разбиений *генеральной выборки* $\mathbb{X}$ на наблюдаемую обучающую выборку X длины ℓ и скрытую контрольную $\bar{X} = \mathbb{X}\backslash X$ длины $k = L - \ell$ равновероятны.

Нашей основной задачей будет вычисление вероятности переобучения для ПМЭР:

$$Q_\varepsilon(A) = P\big[\delta_\mu(X) \geqslant \varepsilon\big] = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{X \in [\mathbb{X}]^\ell} \big[\delta_\mu(X) \geqslant \varepsilon\big],$$

или для РМЭР:

$$Q_\varepsilon(A) = \sum_{a \in A} Q_{\varepsilon,a}(A),$$

где величина $Q_{\varepsilon,a}(A)$ называется *вкладом алгоритма a* в вероятность переобучения:

$$Q_{\varepsilon,a}(A) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{X \in [\mathbb{X}]^\ell} \frac{[a \in A(X)]}{|A(X)|} \big[\delta(a, X)) \geqslant \varepsilon\big].$$

Заметим, что ПМЭР не реализуем на практике, т. к. он «подглядывает» в скрытую выборку на этапе обучения. Теоретически он интересен тем, что даёт верхние оценки вероятности переобучения. Введение РМЭР упрощает вывод точных оценок вероятности переобучения для семейств алгоритмов, обладающих определённой симметрией [3].

Шар алгоритмов и его подмножества

Пусть $d(a, a')$ — расстояние Хэмминга между алгоритмами a и a' как L-мерными бинарными векторами. Введём множества алгоритмов:

$B_r(a_0) = \big\{a \in \{0,1\}^L \colon d(a_0, a) \leqslant r\big\}$ — *шар алгоритмов* с центром в $a_0 \in \{0,1\}^L$ и радиусом r;

$S_r(a_0) = \big\{a \in B_r(a_0) \colon d(a_0, a) = r\big\}$ — *сфера алгоритмов* с центром a_0 и радиусом r;

$A_m = \big\{a \in \{0,1\}^L \colon n(a, \mathbb{X}) = m\big\}$ — *m-й слой*;

$B_r^m(a_0) = B_r(a_0) \cap A_m$ — *m-й слой шара* $B_r(a_0)$;

$S_r^m(a_0) = S_r(a_0) \cap A_m$ — *m-й слой сферы* $S_r(a_0)$.

Шар алгоритмов интересен тем, что это «максимально плотное» множество алгоритмов, обладающее наибольшей связностью среди всех множеств такой же мощности. Следовательно, оценки вероятности переобучения, получаемые для шара или его слоёв, являются оценками «лучшего случая» и могут служить ориентировочными нижними оценками и для других множеств алгоритмов.

Далее приводятся точные оценки вероятности переобучения для шара, его слоёв и некоторых их разреженных подмножеств. Будет показано, что в m-м слое сферы можно взять совсем небольшое подмножество алгоритмов, для которого вероятность переобучения лишь немного отличается от вероятности переобучения соответствующего слоя шара, содержащего на несколько порядков большее число алгоритмов.

Обозначим через $H_L^{l,m}(z)$ гипергеометрическую функцию распределения:

$$H_L^{l,m}(z) = \sum_{s=0}^{\lfloor z \rfloor} h_L^{l,m}(s), \quad h_L^{l,m}(s) = \frac{C_m^s C_{L-m}^{\ell-s}}{C_L^\ell}.$$

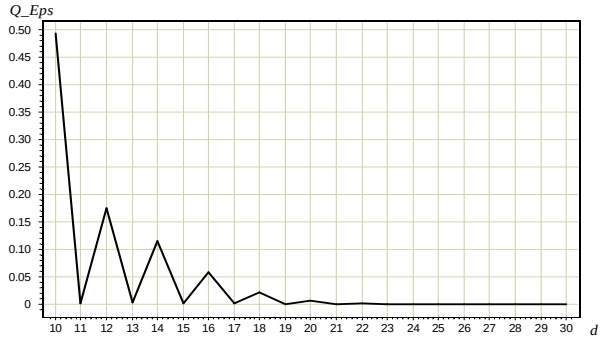


Рис. 1. Вклады слоёв шара в вероятность переобучения, при $l = k = 100,\ m = 20,\ r_0 = 10,\ \varepsilon = 0{,}05$.

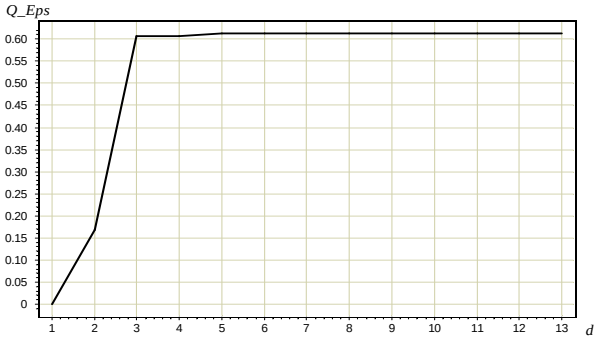


Рис. 2. Зависимость Q_ε от числа d нижних слоев шара, при $l = k = 100,\ m = 10,\ r_0 = 6,\ \varepsilon = 0,05$.

Теорема 1. *Пусть μ — РМЭР, $A = B_{r_0}(a_0)$ — шар алгоритмов, $n(a_0, \mathbb{X}) = m$ и $r_0 \leqslant \min(m, L-m)$. Тогда для любого $\varepsilon \in [0,1]$:*

$$Q_\varepsilon = \sum_{i=0}^{r_0} h_L^{\ell,m}(i)\, \frac{\sum\limits_{r=0}^{r_0}\sum\limits_{n=0}^{r} S(n,r,i)\big[m+r-2n \geqslant \varepsilon k\big]}{\sum\limits_{r=0}^{r_0}\sum\limits_{n=0}^{r} S(n,r,i)} + \sum_{i=r_0+1}^{\lfloor s_d(\varepsilon)\rfloor} h_L^{\ell,m}(i),$$

$$S(n,r,i) = C_{m-i}^{n-i} C_{k-m+i}^{r-n},\ \ s_d(\varepsilon) = \tfrac{\ell}{L}(m-\varepsilon k) + \tfrac{r_0 k}{L}.$$

На рис. 1 показаны значения вкладов слоев шара в вероятность его переобучения. Видно, что наибольший вклад приходится на первые несколько слоев. Поэтому отдельный интерес представляет оценка вероятности переобучения для нескольких нижних слоев шара алгоритмов.

Теорема 2. *Пусть μ — РМЭР, $A = \big\{a \in B_{r_0}(a_0) : m - r_0 \leqslant n(a,\mathbb{X}) \leqslant m - r_0 + d - 1\big\}$ — d нижних слоёв шара, $n(a_0,\mathbb{X}) = m$ и $r_0 \leqslant \min(m, L-m)$. Тогда для любого $\varepsilon \in [0,1]$:*

$$Q_\varepsilon = \sum_{i=0}^{r_0} h_L^{\ell,m}(i)\, \frac{\sum\limits_{r=0}^{r_0}\sum\limits_{n=0}^{r} S'(n,r,i)\,\big[m+r-2n \geqslant \varepsilon k\big]}{\sum\limits_{r=0}^{r_0}\sum\limits_{n=0}^{r} S'(n,r,i)} + \sum_{i=r_0+1}^{\lfloor s_d(\varepsilon)\rfloor} h_L^{\ell,m}(i),$$

где $S'(n,r,i) = C_{m-i}^{n-i} C_{k-m+i}^{r-n}\,[r + r_0 + 1 \leqslant 2n + d]$.

Очевидно, что случай $d = 2r_0 + 1$ соответствует всему шару алгоритмов $B_{r_0}(a_0)$. На рис. 2 представлена зависимость вероятности переобучения нижних слоев шара от их числа. Видно, что вероятность переобучения шара достигается уже на 3–4 его нижних слоях.

Далее мы покажем возможность аппроксимации вероятности переобучения «плотного» семейства $B_{r_0}^m(a_0)$ его разреженным подмножеством.

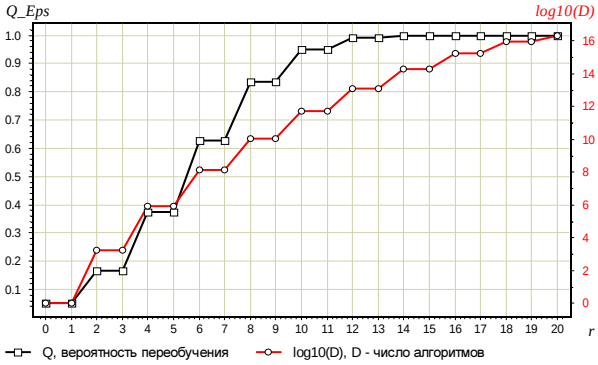


Рис. 3. Зависимость вероятности переобучения Q_ε и $\log_{10}|A|$ от радиуса шара r для m-го слоя шара, при $l = k = 100,\ m = 10,\ \varepsilon = 0{,}05$.

Теорема 3. *Пусть μ — МЭР, $A = B_{r_0}^m(a_0)$ — m-й слой шара, $m \leqslant k$ и $n(a_0,\mathbb{X}) = m$. Тогда для любого $\varepsilon \in [0,1]$:*

$$Q_\varepsilon = \begin{cases} H_L^{\ell,m}\big(\frac{\ell}{L}(m-\varepsilon k) + \lfloor r_0/2\rfloor\big), & m \geqslant \varepsilon k, \\ 0, & m < \varepsilon k. \end{cases}$$

На рис. 3 представлена зависимость вероятности переобучения и логарифма числа алгоритмов семейства $B_r^m(a_0)$ от радиуса r. Благодаря значительной «плотности» данного семейства вероятность переобучения остаётся на приемлемо низком уровне при мощности семейства порядка тысяч.

Следующая лемма показывает, что вероятность переобучения множества алгоритмов, лежащего в слое, может только увеличиться при добавлении к нему новых алгоритмов из того же слоя.

Лемма 4. *Пусть μ — МЭР, $A \subset A_m$ и $a \in A_m \setminus A$. Тогда $Q_\varepsilon(A) \leqslant Q_\varepsilon(A \cup \{a\})$.*

Зададимся целью найти в m-м слое шара подмножество B' малой мощности, чтобы их вероятности переобучения совпадали или хотя бы не сильно отличались: $Q_\varepsilon(B') \lessapprox Q_\varepsilon\big(B_{r_0}^m(a_0)\big)$. Следующая теорема ограничивает область поиска такого подмножества m-м слоем сферы $S_{2\lfloor r_0/2\rfloor}^m(a_0)$.

Введем обозначение $\delta = \lfloor r_0/2\rfloor$.

Теорема 5. *Пусть μ — МЭР, $m = n(a_0, \mathbb{X})$ и $k \geqslant m + \delta$. Тогда $Q_\varepsilon\big(B^m_{r_0}(a_0)\big) = Q_\varepsilon\big(S^m_{2\delta}(a_0)\big)$.*

Итак, вероятность переобучения слоя шара «сосредоточена на его внешней окружности». Построим два подмножества $S^m_{2\delta}(a_0)$, приближающих вероятность переобучения слоя шара. Обозначим через X^m множество объектов, на которых алгоритм a_0 допускает ошибку, $\bar{X}^m = \mathbb{X} \setminus X^m$.

Подмножество алгоритмов $B'(m, r_0)$ образуется всеми C^δ_m различными алгоритмами, которые допускают $m-\delta$ ошибок на X^m и δ ошибок на фиксированных объектах подвыборки $\bar{X}^m$. Очевидно, что оно целиком лежит в $S^m_{2\delta}(a_0)$.

Теорема 6. *Пусть μ — МЭР, $A = B'(m, r_0)$. Тогда для любого $\varepsilon \in [0, 1]$:*

$$Q_\varepsilon = \sum_{\substack{i=0\\ i+j+p=\ell}}^{m} \sum_{j=0}^{h} \sum_{p=0}^{\delta} \frac{C^i_m C^j_h C^p_\delta}{C^\ell_L} \times$$

$$\times \Big(\big[i < \delta\big]\big[p \leqslant s_d(\varepsilon)\big] + \big[i \geqslant \delta\big]\big[i + p \leqslant \delta + s_d(\varepsilon)\big] \Big),$$

где $h = L - m - \delta$, $s_d(\varepsilon) = \frac{\ell}{L}(m - \varepsilon k)$.

Подмножество алгоритмов $B''(m, r_0)$**.** Пусть $L - m$ кратно δ. Семейство B'' — это все $C^\delta_m \frac{L-m}{\delta}$ алгоритмов, допускающих $m - \delta$ ошибок на X^m и δ ошибок на $\bar{X}^m$ при том, что для любого $x \in \bar{X}^m$ существует единственный $a \in B''$: $I(a, x) = 1$. Семейство B'' также является подмножеством $S^m_{2\delta}(a_0)$.

Теорема 7. *Пусть μ — МЭР и $\ell < \frac{L-m}{\delta}$. Тогда $Q_\varepsilon\big(B''(m, r_0)\big) = Q_\varepsilon\big(B^m_{r_0}(a_0)\big)$.*

Численный эксперимент

Вероятность переобучения Q_ε нетрудно оценить эмпирически методом Монте-Карло, если вместо доли всех разбиений выборки взять долю разбиений из заданного случайного подмножества разбиений. В данном эксперименте бралась тысяча случайных разбиений. Сравнивались точные оценки вероятности переобучения множеств $B^m_{r_0}(a_0)$ мощности 809 876 и $B'(m, r_0)$ мощности 45 с эмпирическими оценками $B''(m, r_0)$ мощности 4 275 и множества, состоящего из D случайных представителей $S^m_{2\delta}(a_0)$. Результаты представлены на рисунке 4.

В этом примере условие теоремы 7 не выполняется. Тем не менее семейство B'' достаточно хорошо приближает вероятность переобучения слоя шара. Семейство B' показало худший результат. Это объясняется тем, что алгоритмы из B' не различаются на подвыборке $\bar{X}^m$ и, в отличие от B'', заполняют множество $S^m_{2\delta}(a_0)$ неравномерно. Стоит также заметить, что Q_ε случайного подмножества $S^m_{2\delta}(a_0)$ достигает значения слоя шара при $D \approx 70$, что указывает на избыточность семейства B''.

Рис. 4. Оценки Q_ε для множеств $B^m_{r_0}(a_0)$, B', B'' и случайного подмножества D алгоритмов из $S^m_{2\delta}(a_0)$, при $l = k = 100$, $m = 10$, $r_0 = 4$, $\varepsilon = 0{,}05$.

Выводы

Получены точные формулы для вероятности переобучения модельных семейств алгоритмов — хэммингова шара радиуса r и некоторых его подмножеств. Показано, что на внешней окружности слоя хэммингова шара можно выбрать «разреженное» подсемейство из небольшого числа (порядка десятков) алгоритмов, вероятность переобучения которого будет очень близка к вероятности переобучения всего слоя, состоящего из огромного числа алгоритмов. Таким образом, дано косвенное объяснение экспериментов [4], в которых измеренные значения эффективного локального коэффициента разнообразия также не превосходили нескольких десятков.

Есть основания полагать, что аппроксимация «плотных» семейств их «разреженными» подсемействами является перспективным подходом, который позволит оценивать вероятность переобучения в практических ситуациях. Данная работа является первым шагом в этом направлении.

Литература

[1] *Вапник В. Н., Червоненкис А. Я.* Теория распознавания образов. — М.: Наука, 1974.

[2] *Boucheron S., Bousquet O., Lugosi G.* Theory of classification: A survey of some recent advances // ESAIM: Prob. and Stat. — 2005. — No. 9. — Pp. 323–375.

[3] *Frey A. I.* Accurate estimates of the generalization ability for symmetric sets of predictors and randomized learning algorithms // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 241–250.

[4] *Vorontsov K. V.* Combinatorial probability and the tightness of generalization bounds // Patt. Rec. and Image An. — 2008. — Vol. 18, No. 2. — Pp. 243–259.

[5] *Vorontsov K. V.* Splitting and similarity phenomena in the sets of classifiers and their effect on the probability of overfitting // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 3. — Pp. 412–420.

[6] *Vorontsov K. V.* Exact combinatorial bounds on the probability of overfitting for empirical risk minimization // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 269–285.

Вероятность переобучения плотных и разреженных многомерных сеток алгоритмов*

Фрей А. И.
sashafrey@gmail.com
Московский Физико-технический институт

Известно, что для получения высокоточных оценок обобщающей способности в задачах обучения по прецедентам необходимо вводить более «тонкие» характеристики семейства алгоритмов, чем размерность. Предлагаются две такие характеристики — высота и разреженность. Показывается, что для монотонных и унимодальных многомерных сеток алгоритмов этих характеристик достаточно для получения точной оценки вероятности переобучения. Исследуется зависимость вероятности переобучения от размерности, высоты и разреженности для метода рандомизированной минимизации эмпирического риска.

The probability of overfitting for dense and sparse multidimensional grids of classifiers*

Frei A. I.
Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russia

The dimensional characteristics of the hypotheses set are known to be insufficient for obtaining tight generalization bounds. We propose two novel characteristics — the height and the sparsity of the hypotheses set, and show that they are sufficient to obtain exact generalization bounds for two special sets — the monotonic and unimodal multidimensional grids of classifiers. Then we study how the probability of overfitting depends on dimension, height, and sparsity in the case of randomized empirical risk minimization.

Введение

Для построения надёжных методов обучения по прецедентам необходимо иметь как можно более точные оценки обобщающей способности, например, в виде верхних оценок вероятности переобучения. Известные оценки используют различные характеристики семейства алгоритмов, метода обучения и обучающей выборки [4], в первую очередь, сложность (размерность) семейства алгоритмов. Точность таких оценок может быть недостаточной для практических применений [6]. В [7, 8] показано, что надёжное обучение возможно только для семейств, обладающих одновременно двумя свойствами — расслоением алгоритмов по частотам ошибок и сходством алгоритмов.

Эффект расслоения состоит в том, что при фиксированной обучающей выборке малую частоту ошибок имеет лишь малая доля алгоритмов. Вероятность получить алгоритм в результате обучения резко падает с ростом его частоты ошибок. Поэтому достаточно оценивать сложность лишь нижних слоёв семейства, иначе оценки вероятности переобучения окажутся сильно завышенными.

Эффект сходства состоит в том, что схожие алгоритмы вносят существенно меньший вклад в вероятность переобучения, чем несхожие. Поэтому вероятность переобучения у семейств, непрерывных по параметрам, может оказаться вполне приемлемой даже при высокой размерности.

В [7, 8] было также показано, что учёт этих двух эффектов по отдельности в общем случае не даёт численно точных оценок вероятности переобучения. Но при этом не было предложено каких-либо удобных (желательно, скалярных) численных характеристик расслоения и сходства. Векторную характеристику *профиля расслоения* пока удавалось оценивать только с помощью весьма трудоёмкого метода Монте-Карло [2].

В данной работе вводятся скалярные характеристики *высоты* и *разреженности* семейства алгоритмов, связанные со свойствами расслоения и сходства, соответственно. Рассматриваются модельные семейства — многомерные монотонные и унимодальные сетки алгоритмов, для которых этих двух характеристик (в дополнение к длине выборки и размерности) оказывается достаточно для получения точной оценки вероятности переобучения. Эти семейства впервые были рассмотрены в [1], а их одномерные частные случаи — монотонные и унимодальные цепочки алгоритмов — в [7, 8]. Отличие данной работы в том, что вводится понятие разреженности семейства и применяется теоретико-групповой подход [3] для рандомизированного (а не пессимистичного, как в [1]) метода минимизации эмпирического риска.

Таким образом, показана принципиальная возможность получения точных оценок вероятности переобучения, в которых свойства размерности, расслоения и сходства выражаются тремя скалярными характеристиками, соответственно.

Работа поддержана РФФИ (проект №08-07-00422) и программой ОМН РАН «Алгебраические и комбинаторные методы математической кибернетики и информационные системы нового поколения».

Постановка задачи

Пусть $\mathbb{X} = (x_i)_{i=1}^L$ — генеральная выборка, состоящая из L объектов. Отображения $a\colon \mathbb{X} \to \{0,1\}$ будем называть алгоритмами и говорить, что алгоритм a допускает ошибку на объекте x_i, если $a(x_i) = 1$. Каждому алгоритму взаимно однозначно соответствует бинарный вектор ошибок $\big(a(x_i)\big)_{i=1}^L$.

Величина $n(a,U) = \sum\limits_{x\in U} a(x)$ называется *числом ошибок* алгоритма a на подвыборке $U \subseteq \mathbb{X}$.

Величина $\nu(a,U) = n(a,U)/|U|$ называется *частотой ошибок* алгоритма a на подвыборке $U \subseteq \mathbb{X}$.

Обозначим через $\mathbb{A} = \{0,1\}^L$ множество всех 2^L бинарных векторов длины L, тогда $2^{\mathbb{A}}$ — это множество всех подмножеств $\mathbb{A}$.

Обозначим через $[\mathbb{X}]^\ell$ множество всех ℓ-элементных подмножеств генеральной выборки $\mathbb{X}$.

Детерминированным методом обучения назовем произвольное отображение $\mu\colon 2^{\mathbb{A}} \times [\mathbb{X}]^\ell \to \mathbb{A}$, которое по обучающей выборке $X \in [\mathbb{X}]^\ell$ выбирает из подмножества $A \subseteq \mathbb{A}$ некоторый алгоритм $a = \mu(A,X)$. Метод μ называется *минимизацией эмпирического риска* (МЭР), если выбираемый им алгоритм допускает наименьшее число ошибок на обучении: для всех $X \in [\mathbb{X}]^\ell$ и $A \subseteq \mathbb{A}$

$$\mu(A,X) \in A(X) \equiv \operatorname{Arg}\min_{a\in A} n(a,X).$$

Вопрос о том, какой именно алгоритм a из $A(X)$ выдать в результате обучения, может решаться по-разному. В пессимистичном методе МЭР выбирается алгоритм с максимальным $n(a,\mathbb{X})$, что приводит к верхним оценкам вероятности переобучения [8, 1]. Мы рассматриваем *рандомизированный метод обучения* [3, 5], который произвольным $A \in 2^{\mathbb{A}}$ и $X \in [\mathbb{X}]^\ell$ ставит в соответствие не один алгоритм a, а нормированную функцию $f(a)$, значение которой можно интерпретировать как вероятность получить алгоритм a в результате обучения:

$$\mu\colon 2^{\mathbb{A}} \times [\mathbb{X}]^\ell \to \Big\{ f\colon \mathbb{A} \to [0,1] \;\Big|\; \sum_{a\in\mathbb{A}} f(a) = 1 \Big\}. \quad (1)$$

Примером рандомизированного метода обучения является *рандомизированный метод МЭР*, основанный на равновероятном выборе a из $A(X)$:

$$\mu(A,X)(a) = \big[a \in A(X)\big] \big/ \big|A(X)\big|. \quad (2)$$

Здесь и далее квадратные скобки переводят логическое выражение в число: [истина] = 1, [ложь] = 0.

Пусть $X \sqcup \bar{X} = \mathbb{X}$ — произвольное разбиение генеральной выборки на обучающую выборку $X \in [\mathbb{X}]^\ell$ и контрольную $\bar{X} = \mathbb{X}\backslash X$. *Уклонением частот* назовем разность частот ошибок на контроле и на обучении: $\delta(a,X) = \nu(a,\bar{X}) - \nu(a,X)$.

Зафиксируем параметр $\varepsilon \in (0,1]$.

Будем говорить, что алгоритм a *переобучен* при разбиении $X \sqcup \bar{X}$, если $\delta(a,X) \geqslant \varepsilon$.

Примем единственное вероятностное предположение, что все разбиения генеральной выборки $\mathbb{X}$ на две подвыборки — наблюдаемую обучающую X и скрытую контрольную $\bar{X}$ — равновероятны [8]. Тогда *вероятность переобучения* для детерминированного метода обучения μ определяется как

$$Q_\mu(\varepsilon, A) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{X\in[\mathbb{X}]^\ell} \big[\delta(\mu(A,X),X) \geqslant \varepsilon\big],$$

а для рандомизированного метода μ — как

$$Q_\mu(\varepsilon, A) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum_{X\in[\mathbb{X}]^\ell} \sum_{a\in A} \mu(A,X)(a) \big[\delta(a,X) \geqslant \varepsilon\big].$$

Монотонная сетка алгоритмов

Пусть $\boldsymbol{d} = (d_1,\ldots,d_h) \in \mathbb{Z}^h$ — целочисленный вектор индексов. Обозначим $\|\boldsymbol{d}\| = \max\limits_{j=1,\ldots,h} |d_j|$, $|\boldsymbol{d}| = |d_1| + \ldots + |d_h|$. На множестве векторов индексов введём покомпонентное отношение сравнения: $\boldsymbol{d} \leqslant \boldsymbol{d}'$, если $d_j \leqslant d'_j$, $j = 1,\ldots,h$; и $\boldsymbol{d} < \boldsymbol{d}'$ если хотя бы одно из неравенств $d_j \leqslant d'_j$ строгое.

Определение 1. *Множество алгоритмов* $A_M = \big\{a_{\boldsymbol{d}}\colon \boldsymbol{d} \geqslant \boldsymbol{0},\ \|\boldsymbol{d}\| \leqslant D\big\}$ *называется монотонной h-мерной сеткой алгоритмов высоты D, если $\mathbb{X}$ разбивается на непересекающиеся подмножества U_0, U_1 и $X_j = \{x_j^1,\ldots,x_j^D\}$, $j = 1,\ldots,h$, такие, что:*

1) $a_{\boldsymbol{d}}(x_j^i) = [i \leqslant d_j]$, *где* $x_j^i \in X_j$;
2) $a_{\boldsymbol{d}}(x_0) = 0$ *при всех* $x_0 \in U_0$;
3) $a_{\boldsymbol{d}}(x_1) = 1$ *при всех* $x_1 \in U_1$.

Монотонная сетка — это модель семейства алгоритмов с h непрерывными параметрами, предполагающая, что по мере непрерывного увеличения j-го параметра при фиксированных остальных ошибки возникают последовательно на объектах $x_j^1,\ldots,x_j^D$.

Обозначим $m \equiv |U_1|$. Из определения 1 следует, что $n(a_{\boldsymbol{d}},\mathbb{X}) = m + |\boldsymbol{d}|$. Число алгоритмов в h-мерной монотонной сетке высоты D составляет $(D+1)^h$. Алгоритм $a_{\boldsymbol{0}}$ является *лучшим в сетке*.

Пример 1. Двумерная ($h = 2$) монотонная сетка при $m = 0$ и $L = 4$:

	$a_{0,0}$	$a_{1,0}$	$a_{2,0}$	$a_{0,1}$	$a_{1,1}$	$a_{2,1}$	$a_{0,2}$	$a_{1,2}$	$a_{2,2}$
x_1	0	**1**	**1**	0	**1**	**1**	0	**1**	**1**
x_2	0	0	**1**	0	0	**1**	0	0	**1**
x_3	0	0	0	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**	**1**
x_4	0	0	0	0	0	0	**1**	**1**	**1**

Определение 2. *Разреженностью ρ множества алгоритмов A назовём минимальное хэммингово расстояние между векторами ошибок:*

$$\rho = \min_{a,a'\in A} \sum_{i=1}^L \big|a(x_i) - a'(x_i)\big|.$$

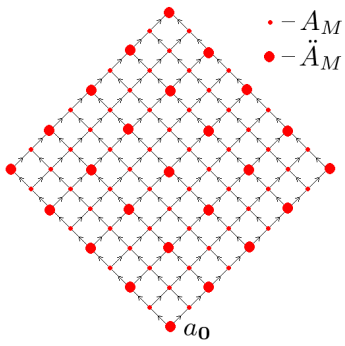


Рис. 1. Разреженная двумерная монотонная сетка. Узлы сетки соответствуют алгоритмам, направление стрелок — возрастанию числа ошибок алгоритмов.

Определение 3. *Разреженной h-мерной монотонной сеткой с разреженностью ρ называется подмножество* $\ddot{A}_M = \{a_{\boldsymbol{d}} \in A_M : \boldsymbol{d} \in (\rho\mathbb{Z})^h\}$.

Если исходная сетка A_M имела высоту D, то величину $\lfloor D/\rho \rfloor$ будем называть высотой сетки $\ddot{A}_M$.

Пример 2. На рис. 1 выделено подмножество алгоритмов двумерной монотонной сетки высоты $D = 8$, соответствующее разреженной монотонной сетке с параметрами $\rho = 2$, $D = 4$.

Введем дополнительные обозначения:

C_n^k — биномиальные коэффициенты, причём будем считать, что $C_n^k = 0$ при $k < 0$ и $k > n$;

$H_L^{\ell,m}(z) = \frac{1}{C_L^\ell} \sum\limits_{s=0}^{\lfloor z \rfloor} C_m^s C_{L-m}^{\ell-s}$ — функция гипергеометрического распределения, $z \in [0, \ell]$;

$Y_*^{h,D} \subset \mathbb{Z}^h$ — множество целочисленных невозрастающих неотрицательных последовательностей длины h, первый член которых не превосходит D;

S_h — группа перестановок элементов последовательности $\boldsymbol{\lambda} \in Y_*^{h,D}$;

$|S_h\boldsymbol{\lambda}|$ — мощность орбиты действия S_h на $\boldsymbol{\lambda}$.

Теорема 1. *Пусть $\ddot{A}_M$ — разреженная h-мерная монотонная сетка высоты D и разреженности ρ. Тогда вероятность переобучения $Q_\mu(\varepsilon, \ddot{A}_M)$ для рандомизированного метода минимизации эмпирического риска дается формулой*

$$Q_\mu(\varepsilon, \ddot{A}_M) = \sum_{\boldsymbol{\lambda} \in Y_*^{h,D}} \sum_{\substack{\boldsymbol{t} \geqslant \rho\boldsymbol{\lambda}, \\ \|\boldsymbol{t}\| \leqslant \rho D}} \frac{|S_h\boldsymbol{\lambda}|}{T(\lfloor \boldsymbol{t}/\rho \rfloor)} \frac{C_{L'}^{\ell'}}{C_L^\ell} H_{L'}^{\ell',m}(s_0),$$

где $\ell' = \ell - \sum\limits_{j=1}^{h} [t_j \neq \rho D]$, $k' = k - |\boldsymbol{t}|$, $L' = \ell' + k'$, $T(\boldsymbol{t}) = \prod\limits_j (t_j + 1)$, $s_0 = \frac{\ell}{L}(m + \rho|\boldsymbol{\lambda}| - \varepsilon k)$.

При $\rho = 1$ данная формула дает вероятность переобучения неразреженной сетки алгоритмов A_M.

Унимодальная сетка алгоритмов

Унимодальная сетка является более реалистичной моделью семейства с h непрерывными параметрами, по сравнению с монотонной сеткой. Предполагается, что непрерывное отклонение j-го параметра не только в бóльшую, но и в меньшую, сторону от оптимального значения приводит к увеличению числа ошибок.

Определение 4. *Множество алгоритмов* $A_U = \{a_{\boldsymbol{d}} : \|\boldsymbol{d}\| \leqslant D\}$ *называется унимодальной h-мерной сеткой алгоритмов высоты D, если $\mathbb{X}$ разбивается на непересекающиеся подмножества U_1, U_0, $X_j = \{x_j^1, \ldots, x_j^D\}$, $Y_j = \{y_j^1, \ldots, y_j^D\}$, $j = 1, \ldots, h$, такие, что:*

1) $a_{\boldsymbol{d}}(x_j^i) = [d_j > 0][i \leqslant |d_j|]$, *где* $x_j^i \in X_j$;
2) $a_{\boldsymbol{d}}(y_j^i) = [d_j < 0][i \leqslant |d_j|]$, *где* $y_j^i \in Y_j$;
3) $a_{\boldsymbol{d}}(x_0) = 0$ *при всех* $x_0 \in U_0$;
4) $a_{\boldsymbol{d}}(x_1) = 1$ *при всех* $x_1 \in U_1$.

Данное определение отличается от определения монотонной сетки отсутствием ограничения $\boldsymbol{d} \geqslant \mathbf{0}$. Число алгоритмов в h-мерной унимодальной сетке высоты D равно $(2D+1)^h$. Как и для монотонной сетки, число ошибок $n(a_{\boldsymbol{d}}, \mathbb{X})$ алгоритма $a_{\boldsymbol{d}}$ равно $m + |d|$, где $m \equiv |U_1|$.

Определение 5. *Разреженной h-мерной унимодальной сеткой с разреженностью ρ называется подмножество* $\ddot{A}_U = \{a_{\boldsymbol{d}} \in A_U : \boldsymbol{d} \in (\rho\mathbb{Z})^h\}$.

Если исходная сетка A_U имела высоту D, то величину $\lfloor D/\rho \rfloor$ будем называть высотой сетки $\ddot{A}_U$.

Обозначим через $n(\boldsymbol{\lambda})$ число ненулевых компонент последовательности $\boldsymbol{\lambda} \in Y_*^{h,D}$.

Теорема 2. *Пусть $\ddot{A}_U$ — разреженная h-мерная унимодальная сетка высоты D и разреженности ρ. Тогда вероятность переобучения $Q_\mu(\varepsilon, \ddot{A}_U)$ для рандомизированного метода минимизации эмпирического риска дается формулой*

$$Q_\mu(\varepsilon, \ddot{A}_U) = \sum_{\boldsymbol{\lambda} \in Y_*^{h,D}} \sum_{\substack{\boldsymbol{t} \geqslant \rho\boldsymbol{\lambda}, \\ \|\boldsymbol{t}\| \leqslant \rho D}} \sum_{\substack{\boldsymbol{t'} \geqslant \mathbf{0}, \\ \|\boldsymbol{t'}\| \leqslant \rho D}} \mathbb{S}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{t}, \boldsymbol{t'}),$$

$$\mathbb{S}(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{t}, \boldsymbol{t'}) = \frac{|S_h\boldsymbol{\lambda}| \cdot 2^{n(\boldsymbol{\lambda})}}{T(\lfloor \boldsymbol{t}/\rho \rfloor + \lfloor \boldsymbol{t'}/\rho \rfloor)} \frac{C_{L'}^{\ell'}}{C_L^\ell} H_{L'}^{\ell',m}(s_0),$$

$\ell' = \ell - \sum\limits_{j=1}^{h} \big([t_j \neq \rho D] + [t'_j \neq \rho D]\big)$, $k' = k - |\boldsymbol{t}| - |\boldsymbol{t'}|$, *остальные обозначения те же, что в теореме 1.*

Вычислительный эксперимент

На рис. 2 показана зависимость вероятности переобучения h-мерной монотонной сетки от ее высоты. При увеличении высоты сетки свыше $D = 5$ вероятность переобучения выходит на константу. Поэтому дальнейшие графики построены при малом значении параметра $D = 3$.

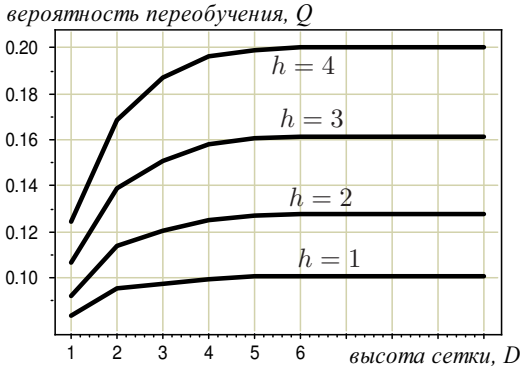


Рис. 2. Зависимость $Q_\mu(\varepsilon, \ddot{A}_M)$ от высоты D монотонной сетки при $L = 150,\ \ell = 90,\ \varepsilon = 0.05,\ m = 5,\ \rho = 1$.

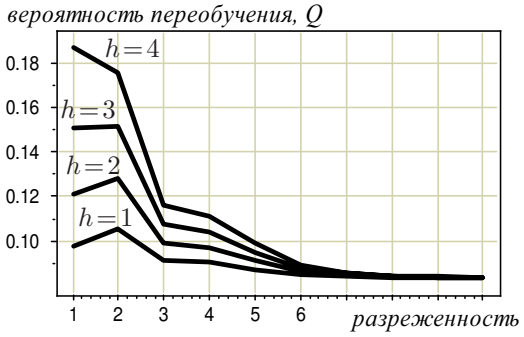


Рис. 3. Зависимость $Q_\mu(\varepsilon, \ddot{A}_M)$ от разреженности ρ при $L = 150,\ \ell = 90,\ \varepsilon = 0{,}05,\ D = 3,\ m = 5$.

На рис. 3 изображена зависимость вероятности переобучения h-мерной монотонной сетки при $h = 1, 2, 3, 4$ от разреженности ρ. При увеличении разреженности ρ вероятность переобучения падает, и вскоре выходит на константу, соответствующую вероятности переобучения лучшего алгоритма семейства a_0. Это связано с тем, что с увеличением ρ вероятность получить в результате обучения алгоритм a_0 стремится к единице.

На рис. 4 приведены результаты сравнения разреженных h-мерных унимодальных сеток с разреженными $2h$-мерными монотонными сетками, при $h = 1$ и $h = 2$. Серая кривая соответствует вероятности переобучения унимодальной сетки. Результаты подтверждают гипотезу [1] о том, что вероятность переобучения унимодальной сетки и монотонной сетки двойной размерности очень близки.

Выводы

В работе предложены два новых параметра множества алгоритмов — *разреженность* и *высота*. Для разреженных монотонных и унимодальных сеток показано, что эти параметры, наряду с длиной выборки и размерностью, определяют вероятность переобучения. Получены точные формулы вероятности переобучения для плотных ($\rho = 1$) и разреженных ($\rho > 1$) многомерных монотонных и унимодальных сеток в случае рандомизированной минимизации эмпирического риска. С помощью полученных формул экспериментально установлено, что в широком диапазоне параметров для монотонных и унимодальных сеток вероятность переобучения определяется несколькими нижними слоями семейства. Также показано, что с увеличением разреженности семейства вероятность получить лучший алгоритм в результате обучения стремится к единице.

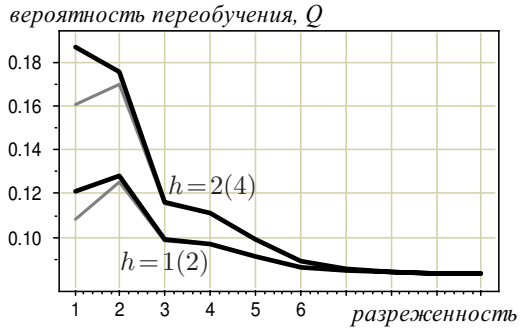


Рис. 4. Сравнение $Q_\mu(\varepsilon, \ddot{A}_M)$ и $Q_\mu(\varepsilon, \ddot{A}_U)$ от ρ при $L = 150,\ \ell = 90,\ \varepsilon = 0{,}05,\ D = 3,\ m = 5,\ h = 1(2), 2(4)$.

Литература

[1] *Ботов П. В.* Точные оценки вероятности переобучения для монотонных и унимодальных семейств алгоритмов // Всеросс. конф. ММРО-14. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 7–10.

[2] *Кочедыков Д. А.* Структуры сходства в семействах алгоритмов классификации и оценки обобщающей способности // Всеросс. конф. ММРО-14. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 45–48.

[3] *Фрей А. И.* Точные оценки вероятности переобучения для симметричных семейств алгоритмов // Всеросс. конф. ММРО-14. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 66–69.

[4] *Boucheron S., Bousquet O., Lugosi G.* Theory of classification: A survey of some recent advances // ESAIM: Probability and Statistics. — 2005. — No. 9. — Pp. 323–375.

[5] *Frey A. I.* Accurate Estimates of the Generalization Ability for Symmetric Sets of Predictors and Randomized Learning Algorithms // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 241–250.

[6] *Vorontsov K. V.* Combinatorial probability and the tightness of generalization bounds // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2008. — Vol. 18, No. 2. — Pp. 243–259.

[7] *Vorontsov K. V.* Splitting and similarity phenomena in the sets of classifiers and their effect on the probability of overfitting // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 3. — Pp. 412–420.

[8] *Vorontsov K. V.* Exact combinatorial bounds on the probability of overfitting for empirical risk minimization // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — Vol. 20, No. 3. — Pp. 269–285.

Топологический подход к выводу условий равномерной по классу событий сходимости частот к вероятностям*

Хачай М. Ю.
mkhachay@imm.uran.ru
Екатеринбург, Институт математики и механики УрО РАН

В статье показывается, что наличие равномерной по классу событий равномерной сходимости частот к вероятностям следует из σ-компактности подходящего псевдометрического пространства.

Topological approach to proving conditions of the uniform on a class of events convergence of frequencies to probabilities*

Khachay M. Yu.
Intitute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of RAS, Ekaterinburg, Russia

In the paper, it is shown that existence of the uniform on a class of events convergence of frequencies to probabilities follows from the σ-compactness condition of the appropriate pseudo-metric space.

Введение

Задача обучения распознаванию образов в простейшем случае двух классов может быть сформулирована [1] следующим образом. Задано вероятностное пространство $(\Xi \times \Omega, \mathcal{A}, P)$. Здесь Ξ интерпретируется как множество результатов измерительных экспериментов, проводимых над объектами, подлежащими распознаванию, и, как правило, является подмножеством $\mathbb{R}^n$. Множество $\Omega = \{0, 1\}$ играет роль множества номеров (названий) классов (образов), и $\mathcal{A}$ — некоторая σ-алгебра подмножеств $\Xi \times \Omega$, например, порожденная борелевской σ-алгеброй подмножеств $\mathbb{R}^n$. Особенность задачи обучения состоит в том, что пространство элементарных исходов $\Xi \times \Omega$ и σ-алгебра событий предполагаются известными исследователю, а вероятностная мера P — нет. Точнее, мера P задается конечной выборкой «заверенных» результатов измерений

$$(x_1, \omega_1), \ldots, (x_l, \omega_l), \tag{1}$$

называемой обучающей. Дополнительно задается множество индикаторных функций

$$\mathcal{F} = \{f_\alpha : \Xi \to \Omega \colon \alpha \in \Lambda\},$$

называемых решающими правилами. Для каждого $\alpha \in \Lambda$ множество $S_\alpha = \{(x, \omega) \colon \omega \neq f_\alpha(x)\}$ предполагается измеримым, т. е. обладает вероятностью $\mathsf{P}(S_\alpha)$, интерпретируемой как вероятность неверной классификации правилом f_α. Задача обучения распознаванию состоит в поиске решающего правила, обладающего наименьшей вероятностью ошибочной классификации

$$\min\Big\{\mathsf{P}(S_\alpha) \equiv \int\limits_{\Xi\times\Omega} (w - f_\alpha(x))^2 dP(x, \omega) \colon \alpha \in \Lambda\Big\}. \tag{2}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Президиума УрО РАН, проекты № проекты 09-П-1-1001 и 09-С-1-1010, и РФФИ, проекты № 10-01-00273 и 10-07-00134

Если бы мера P была известна, задача (2) являлась бы задачей вариационного исчисления и могла быть (при необременительных допущениях) решена аналитически. Однако в в общем случае, когда мера P лишь задана выборкой (1), задача требует дополнительной формализации.

Метод минимизации эмпирического риска [1] является одним из общепризнанных и хорошо исследованных подходов к построению такой формализации. В рамках данного подхода предлагается каждому решающему правилу (событию S_α) сопоставить частоту $\nu(S_\alpha)$ ошибок классификации, вычисленную по обучающей выборке (1), и для поиска приближенного решения задачи (2) перейти к решению задачи

$$\min\Big\{\nu(S_\alpha) \equiv \frac{1}{l}\sum_{i=1}^{l} (\omega_i - f_\alpha(x_i))^2 \colon \alpha \in \Lambda\Big\}. \tag{3}$$

Задача (3) вполне формализована и разрешима при произвольной выборке (1). К сожалению, ее оптимальное решение $\alpha^* = \alpha^*((x_1, \omega_1), \ldots, (x_l, \omega_l))$ зависит от случайной выборки (1) и, вообще говоря, не обязано быть близко к решению исходной задачи (2), даже приближенному.

Говорят, что задача (3) *корректно аппроксимирует* задачу (2), если

$$P(S_{\alpha^*}) \xrightarrow{P} \inf_{\alpha\in\Lambda} P(S_\alpha)$$

при стремлении длины выборки к бесконечности.

Естественным достаточным условием корректной аппроксимируемости задачи (2) задачей (3) является условие равномерной сходимости частот к вероятностям по классу событий S_α.

Определение 1. *Пусть $(X, \mathcal{A}, P)$ — вероятностное пространство и $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}$ — произвольный класс событий. Говорят, что имеет место равномерная*

сходимость частот к вероятностям по классу $\mathcal{B}$, если выполнено одно из условий

$$\sup_{B\in\mathcal{B}}|\nu(B)-P(B)| \xrightarrow{P} 0,$$
$$\sup_{B\in\mathcal{B}}|\nu(B)-P(B)| \xrightarrow{\text{п.н.}} 0,$$

при стремлении $l\to\infty$. В первом случае говорят о сходимости по вероятности, а во втором — почти наверное.

Очевидно, наличие равномерной сходимости (почти наверное) частот к вероятностям для произвольного конечного класса $\mathcal{B}$ следует из усиленного закона больших чисел. Для бесконечных классов известен критерий, доказанный В. Н. Вапником и А. Я. Червоненкисом [1], связывающий наличие равномерной сходимости с условием подлинейного роста энтропии класса $\mathcal{B}$, а также ряд достаточных условий [1, 2], основанных на оценках емкости (VCD) класса событий. Однако практическое использование критерия затруднено неизвестностью исходной вероятностной меры, используемой при вычислении энтропии, а достаточные условия ориентированы на наихудший случай и потому излишне осторожны.

В данной работе предлагается новый подход к выводу достаточных условий равномерной по классу событий сходимости частот к вероятностям, опирающийся исключительно на топологические свойства индуцированной им σ-алгебры.

Сигма-компактность псевдометрического пространства, определяемого мерой

Пусть $(X,\mathcal{A},\mu)$ — измеримое пространство, μ — неотрицательная конечная счетно-аддитивная мера. Как известно, мера μ порождает псевдометрику

$$\rho_\mu(A,B)=\mu(A\triangle B)\equiv\mu(A\setminus B)+\mu(B\setminus A),$$

разбивающую σ-алгебру $\mathcal{A}$ на классы эквивалентности

$$(\forall A,B\in\mathcal{A})\ (A\sim B)\ \Leftrightarrow\ (\rho_\mu(A,B)=0).$$

Псевдометрику ρ_μ принято называть расстоянием Фреше-Никодима, а определяемое ей метрическое пространство $((\mathcal{A}/\sim),\rho_\mu)$ — метрической булевой алгеброй. В данном разделе исследуются свойства исходного псевдометрического пространства $(\mathcal{A},\rho_\mu)$.

Теорема 1. *Пространство $(\mathcal{A},\rho_\mu)$ полно.*

Приведем условия, необходимые и достаточные для компактности и σ-компактности пространства $(\mathcal{A},\rho_\mu)$. По теореме Хаусдорфа, справедливой для псевдометрических пространств, компактность полного пространства $(\mathcal{A},\rho_\mu)$ эквивалентна существованию конечной ε-сети (для каждого $\varepsilon>0$). Пространство $(\mathcal{A},\rho_\mu)$ называется σ-компактным, если найдется не более чем счетное семейство компактов $\{\mathcal{C}_n\}$ такое, что $\mathcal{C}_n\subset\mathcal{A}$ и $\mathcal{A}=\bigcup_n\mathcal{C}_n$.

Определение 2. *Элемент $A\in\mathcal{A}$ называется атомом меры μ, если $\mu(A)>0$ и*

$$(\forall B\in\mathcal{A},\ B\subset A)\ \ (\mu(B)=\mu(A))\vee(\mu(B)=0).$$

Пусть $\mathcal{A}'\subset\mathcal{A}$ — семейство попарно не эквивалентных атомов. Очевидно, $\mathcal{A}'$ не более чем счетно. Кроме того, без ограничения общности можно полагать, что $\mathcal{A}'$ дизъюнктно. Введем обозначение

$$X'=X\setminus\bigcup_{A\in\mathcal{A}'}A.$$

Определение 3. *Мера μ называется (чисто) атомической, если $\mu(X')=0$. Мера μ называется безатомной, если $\mathcal{A}'=\varnothing$.*

Опишем несколько важных для дальнейших рассуждений свойств безатомной конечной σ-аддитивной меры.

Лемма 2 (Сакс). *Пусть мера μ безатомная. Справедливы следующие соотношения.*

1. *Для произвольного $\alpha>0$ и произвольного*
$$A\in\mathcal{A},\ \mu(A)>0,$$
найдется элемент
$$B\in\mathcal{A},\ B\subset A,$$
такой, что $0<\mu(B)\leqslant\alpha$.
2. *Для произвольного $\varepsilon\in(0,\mu(X)]$ существует разбиение*
$$F_1\cup\ldots\cup F_n=X,\ n=n(\varepsilon),$$
такое, что $\mu(F_i)\leqslant\varepsilon$.

Лемма 3. *Пусть мера μ безатомная. Найдется элемент $A\in\mathcal{A}$ такой, что*

$$\mu(A)=\frac{\mu(X)}{2}.$$

Лемма 4. *Пусть $\mu(X)>0$ и мера μ безатомная. Существует последовательность $\{S_n\}_{n=1}^\infty\subset\mathcal{A}$ такая, что $\mu(S_n)>0$ и $\rho_\mu(S_i,S_j)\geqslant\mu(X)/2$ для произвольных $i\neq j$.*

Перейдем к рассмотрению свойств атомической меры. Пусть мера μ атомическая, $\{A_i\}\subset\mathcal{A}$ — семейство попарно не эквивалентных атомов, определяющих меру μ. Тогда, очевидно, для произвольного $A\in\mathcal{A}$

$$\mu(A)=\sum_{\mu(A\cap A_i)>0}\mu(A_i).$$

Справедлива [3] следующая теорема.

Теорема 5. *Следующие условия эквивалентны:*
1) *пространство* $(\mathcal{A}, \rho_\mu)$ *компактно,*
2) *пространство* $(\mathcal{A}, \rho_\mu)$ *σ-компактно,*
3) *мера* μ *атомическая.*

Заметим, что при условии сепарабельности пространства $(\mathcal{A}, \rho_\mu)$ (которому, очевидно, удовлетворяют компактные и σ-компактные пространства) удается конструктивно описать структуру атомов меры μ. Пусть $K \subset \mathcal{A}$ — не более чем счетное всюду плотное подмножество и

$$Z = X \setminus \bigcup \{A\colon A \in K\}.$$

Поскольку $\mathcal{A}$ — σ-алгебра, $Z \in \mathcal{A}$. Убедимся в том, что $\mu(Z) = 0$. В самом деле, для произвольного $n \in \mathbb{N}$ найдется элемент

$$A = A(Z, n) \in K$$

такой, что $\rho_\mu(A, Z) < 1/n$. По выбору Z, справедливо равенство $A \cap Z = \varnothing$. Предположив для какого-либо натурального m, что $\mu(Z) \geqslant 1/m$, получим противоречие:

$$\frac{1}{m} > \rho_\mu(A(Z,m), Z) = \\ = \mu(A(Z,m) \setminus Z) + \mu(Z \setminus A(Z,m)) = \\ = \mu(A(Z,m)) + \mu(Z) \geqslant \frac{1}{m}. \quad (4)$$

Следовательно, $\mu(Z) < 1/n$ при произвольном $n \in \mathbb{N}$, т. е. $\mu(Z) = 0$.

Пусть далее $\mathcal{P} \subset \mathcal{A}$ — алгебра, порожденная семейством K, и

$$Z_1 = \cup\{C \in \mathcal{P}\colon \mu(C) = 0\}.$$

Так как алгебра $\mathcal{P}$ не более чем счетна, а μ — счетно-аддитивная мера, то $\mu(Z_1) = 0$, значит, и $\mu(Z \cup Z_1) = 0$. Пусть

$$X_1 = X \setminus (Z \cup Z_1) \text{ и } \mathcal{P}_1 = \{A \cap X_1\colon A \in \mathcal{P}\}.$$

По построению, $\mathcal{P}_1$ — алгебра, и для произвольного $D \in \mathcal{P}_1$

$$(\mu(D) = 0) \ \Rightarrow (D = \varnothing).$$

Определим на X_1 бинарное отношение $\sim$ правилом

$$(x \sim y) \ \Leftrightarrow \ (\forall D \in \mathcal{P}_1)\ (\{x, y\} \subset D) \vee (\{x, y\} \cap D = \varnothing).$$

Введенное отношение, очевидно, является отношением эквивалентности. Пусть

$$(X_1/\sim) = \{Y_\alpha\colon \alpha \in \Lambda\}.$$

Заметим, что класс эквивалентности Y_α, представителем которого является некоторый $x \in X_1$, может быть задан равенством

$$Y_\alpha = \cap\{D \in \mathcal{P}_1\colon x \in D\},$$

следовательно, $Y_\alpha \in \mathcal{A}$, так как алгебра $\mathcal{P}_1$ не более чем счетна. Пусть

$$\Lambda_1 = \{\alpha \in \Lambda\colon \mu(Y_\alpha) > 0\}.$$

Множество Λ_1 также не более чем счетно, поскольку классы Y_α попарно дизъюнктны.

Теорема 6. *Пусть пространство* $(\mathcal{A}, \rho_\mu)$ *сепарабельно, тогда множество атомов меры* μ *совпадает с семейством* $\{Y_\alpha\colon \alpha \in \Lambda_1\}$ *с точностью до эквивалентности.*

Заметим, что условие теоремы 6 явно не использует свойства множества X. Следует ожидать, что при добавлении дополнительных ограничений на его структуру могут быть получены более точные результаты. Например, известна [4] следующая теорема.

Теорема 7. *Пусть* $(X, \mathcal{A}, \mu)$ *— измеримое пространство, где* X *является метрическим пространством, а* σ*-алгебра* $\mathcal{A}$ *содержит борелевскую* σ*-алгебру. Тогда каждый атом меры* μ *эквивалентен подходящему одноточечному множеству.*

Равномерная по классу событий сходимость частот к вероятностям

Договоримся всюду ниже дополнительно предполагать, что изучаемая мера μ является вероятностной, и вернемся к традиционным для теории вероятностей терминологии и обозначениям. В частности, измеримое пространство будем называть вероятностным и обозначать $(X, \mathcal{A}, P)$, элементы σ-алгебры $\mathcal{A}$ будем называть событиями, а значение меры $P(A)$ для произвольного $A \in \mathcal{A}$ — вероятностью события A. Свяжем полученные в предыдущих разделах результаты с условием равномерной сходимости частот к вероятностям по заданному классу событий $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}$. Как упоминалось выше, наличие равномерной сходимости (с вероятностью 1) для произвольного конечного $\mathcal{B}$ является прямым следствием усиленного закона больших чисел. Понятие конечно-аппроксимируемого класса, введенное А. А. Боровковым, позволяет распространить это свойство на бесконечные классы событий.

Определение 4. *Класс событий* $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}$ *называется конечно-аппроксимируемым, если для произвольного* $\varepsilon \in (0, 1)$ *найдутся число* $n = n(\varepsilon)$ *и конечный класс* $\mathcal{C} = \mathcal{C}(\varepsilon) \subset \mathcal{A}$, $|\mathcal{C}| = n$, *такие, что*

$$(\forall B \in \mathcal{B})\ (\exists C_1, C_2 \in \mathcal{C}) \\ (C_1 \subset B \subset C_2) \wedge (\rho_p(C_1, C_2) \equiv P(C_2 \backslash C_1) < \varepsilon)\,. \quad (5)$$

Известна [5] следующая теорема.

Теорема 8. *Пусть* $(X, \mathcal{A}, P)$ *вероятностное пространство и* $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}$ *— конечно-аппроксимируемый*

класс событий, тогда

$$\sup_{B\in\mathcal{B}}|\nu(B)-P(B)|\xrightarrow{\text{п.н.}}0.$$

Заметим, что, по теореме Хаусдорфа, замыкание произвольного конечно-аппроксимируемого класса $\mathcal{B}$ в псевдометрическом пространстве $(\mathcal{A},\rho_P)$ компактно. К сожалению, даже компактности класса $\mathcal{B}$ не всегда достаточно для наличия равномерной (по этому классу) сходимости частот к вероятностям. Тем не менее, справедлива [3] следующая теорема.

Теорема 9. *Пусть $(X,\mathcal{A},P)$ вероятностное пространство.*

1. *Если мера P атомическая, то для произвольного не более чем счетного класса событий $\mathcal{B}\subset\mathcal{A}$ справедливо условие*

$$\sup_{B\in\mathcal{B}}|\nu(B)-P(B)|\xrightarrow{\text{п.н.}}0.$$

2. *Если мера P не является атомической, то в пространстве $(\mathcal{A},\rho_P)$ существует не более чем счетный компакт $\mathcal{B}$ такой, что для произвольной выборки длины $l\in\mathbb{N}$,*

$$\sup_{B\in\mathcal{B}}|\nu(B)-P(B)|=1.$$

Замечание 1. Условие п. 1 теоремы 9, фактически, влечет конечную аппроксимируемость класса событий $\mathcal{B}$, которая, в силу теоремы 8, влечет наличие сходимости (с вероятностью 1) частот к вероятностям, равномерной по этому классу.

Замечание 2. Условие п. 1 теоремы 9, в силу справедливости теоремы 5, эквивалентно условию σ-компактности пространства $(\mathcal{A},\rho_P)$. Очевидно, последнее условие может быть ослаблено. Для наличия равномерной сходимости частот к вероятностям по классу $\mathcal{B}$ достаточно σ-компактности пространства $(\mathcal{A}(\mathcal{B}),\rho_{P'})$, где $\mathcal{A}(\mathcal{B})\subset\mathcal{A}$ — σ-алгебра, индуцированная классом $\mathcal{B}$, а P' — сужение меры P на $\mathcal{A}(\mathcal{B})$.

Замечание 3. Если дополнительно к условию п. 1 теоремы 9 каждый атом меры P эквивалентен некоторому одноэлементному подмножеству $\{x\}$ множества элементарных исходов X, то равномерная сходимость имеет место по произвольному классу событий $\mathcal{B}\subset\mathcal{A}$. В частности, данное утверждение верно для произвольного дискретного вероятностного пространства.

Выводы

В данной работе получено новое достаточное условие равномерной сходимости частот к вероятностям. Показано, что для существования сходимости (почти наверное или по вероятности) частот к вероятностям, равномерной по заданному классу событий, достаточно сигма-компактности индуцированной этим классом σ-алгебры. Вопрос доказательства необходимости этого условия (или построения соответствующего контрпримера) в настоящее время остается открытым, хотя п. 2 теоремы 9 может рассматриваться как первый шаг в этом направлении.

Литература

[1] *Вапник В. Н., Червоненкис А. Я.* Теория распознавания образов. — М.: Наука, 1974. — 528 с.

[2] *Vapnik V. N.* Statistical learning theory. New York: Wiley, 1998. 740 p.

[3] *Пыткеев Е. Г, Хачай М. Ю.* Сигма-компактность метрических булевых алгебр и равномерная сходимость частот к вероятностям // Труды Института математики и механики. — 2010. — Т. 16, № 1. — С. 127–139.

[4] *Кадец В. М.* Курс функционального анализа. — Харьков: Издательство Харьковского национального университета, 2004. — 504 с.

[5] *Боровков А. А.* Математическая статистика. — Новосибирск: Наука; Изд-во Института математики СО РАН, 1997. — 772 с.

О «линеаризации» задачи разделения классов в пространствах с неархимедовами метриками*

Чернов В. М.
vche@smr.ru
Самара, Институт систем обработки изображений РАН

В работе обсуждаются две связанные между собой задачи. Первая — построение гиперплоскостей, разделяющих счетные множества в пространствах с неархимедовыми метриками. Вторая — построения теории меры и интеграла в пополнениях пространств с неархимедовыми метриками, ассоциированный с алгоритмом построения разделяющих гиперплоскостей.

On a “linearization” of separation classes problem for spaces with non-archmedian metrices*

Chernov V. M.
Image Processing Systems Institute (IPSI) RAS, Samara, Russia

The two related problems are analyzed in this paper. The first is the construction of hyperplanes, which divide enumerable sets in spaces with non-Archimedean metrics. The second is the construction of measure theory and integral in completions of spaces with non-Archimedean metrics, associated with the algorithm of separating hyperplanes construction.

Решение задачи классификации точек в пространстве признаков предполагает построение разделяющей поверхности, причем решение о принадлежности точек тому или иному классу принимается в результате сравнения значения разделяющей функции в классифицируемой точке признакового пространства с некоторым эталонным значением. Как правило, это сравнение связано с бинарными отношениями «больше — меньше» на множестве действительных чисел. Ясно, что указанные бинарные отношения могут быть заменены иными, но подчиняющимися естественным требованием к вычислительной сложности алгоритмов разделения:

- существование вычислительно простой процедуры проверки: находится ли значение разделяющей функции в точке и эталонного элемента (числа) в данном отношении;
- существование достаточно широкого класса функций, значение которых в точках признакового пространства легко вычисляются;
- согласованность выбора класса разделяющих функций, бинарного отношения и свойств той (числовой) структуры, элементы которой интерпретируются как точки признакового пространства.

Практик имеет дело с признаковыми пространствами, координаты точек которых — рациональные числа, расположенные в узлах рациональной решетки с ограниченным снизу расстоянием между узлами. После масштабирования координаты можно считать целыми числами. Для целых чисел, в отличие от рациональных чисел, кроме обычного отношения порядка существует, в частности, и частичное отношение порядка, связанное с делимостью. Это отношение делимости может быть интерпретировано и в метрической форме, в терминах удаленности одной целочисленной точки (или точки решетки с фиксированным рациональным шагом) от другой такой точки. С увеличением объема анализируемой выборки, шаг решетки, в узлах которой лежат анализируемые точки, естественно, уменьшается. Это приводит к идее рассмотрения класса пополнений пространства $\mathbb{Q}^n$ относительно некоторого класса метрик, отличных от традиционных пространств $\mathbb{R}^n$.

Кроме того, желательно рассмотрение таких метрик, для которых задача о принадлежности точки к тому или иному классу формулировалась бы и эффективно решалась в терминах удаленности, расстояния распознаваемой точки от гиперплоскости (или семейства гиперплоскостей). Иными словами, первой основной целью работы является описание достаточно общей конструкции класса полных метрических пространств, для которых задача распознавания в некотором смысле «линеаризуется» благодаря возможности выбора нетрадиционной метрики.

Следует отметить, что наряду с достаточно традиционными подходами к пополнению поля $\mathbb{Q}$ до полного поля $\mathbb{R}$ («по Дедекинду», «по Коши–Кантору»), существуют и менее известные конструкции, явно опирающиеся на представление рациональных чисел в той или иной позиционной системе счисления [1]. Такой подход [2–5] не обязательно использует архимедову метрику для пополнения поля $\mathbb{Q}$, что естественно приводит к полным пространствам, отличным от $\mathbb{R}$, которые и яв-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-01-00511а.

ляются одним из предметов исследования настоящей работы. Примеры, рассматриваемые в первых двух разделах иллюстрируют идею построения пространств с метриками, относительно которых задача разделения классов в некотором смысле линеаризуется.

Предлагаемые методы построения линейных разделяющих поверхностей, связанные с представлением числовых данных в различных системах счисления, могут порождать неустойчивые решающие правила. Это определяет вторую цель работы, связанную с разработкой специфического математического аппарата для анализа «степени типичности» того или иного подмножества счетного множества. Традиционный вероятностный аппарат, базирующийся на теории интеграла и меры Лебега, недостаточно приспособлен для анализа именно счетных массивов данных, множество которых имеет нулевую лебегову меру. Кроме того, например, на алгебре подмножеств натуральных чисел нельзя ввести инвариантную относительно аддитивного сдвига и ограниченную сигма-аддитивную функцию подмножеств (меру) так, чтобы одноточечные подмножества имели равные ненулевые меры. Часто же используемая в теории чисел функция асимптотической плотности подмножества, не является счетно-аддитивной. [9]. Иными словами, крайне затруднительно характеризовать «степень типичности» (меру, вероятность) подмножества нулевой меры по отношению к пространству нулевой меры Лебега в классических вероятностных терминах. Это ставит, в частности, перед специалистом в области распознавания образов дилемму:

1) либо разработать и использовать аналоги вероятностного аппарата для пространств с конечно аддитивными, но не счетно-аддитивными «мерами» и использовать аналоги предельных теорем теории вероятностей в «допредельной» версии и с асимптотической оценкой погрешности, вносимой остаточным членом;
2) либо использовать такие вложения пространств счетной мощности в континуальные пространства, при которых и само пополнение и мера (Хаара) на нем *порождается* обучающей выборкой и, по возможности, максимально отражают специфические свойства этой выборки.

Оба указанных подхода, как первый [6], так и второй [7–10], характерны для так называемой вероятностной теории чисел, представляющей, в неформальной терминологии, «теорию вероятности на множестве нулевой лебеговой меры». Следует отметить, что использование вероятностных моделей и методов, не опирающихся на колмогоровскую аксиоматику теории вероятностей, характерно в последние годы не только для специалистов в области теории чисел, но и для физиков-теоретиков [17–18]. Например, из аннотации к монографии [17]: «Рассматриваются подходы к аксиоматикам теории вероятностей, отличающимся от общепринятой в настоящее время аксиоматики А. Н. Колмогорова. Необходимость в этом возникла в связи с трудностями при использовании современной теории вероятностей для описания некоторых явлений в квантовой механике». В работе мы рассматриваем второй подход и придерживаемся, в основном, общего метода, описанного в монографии [11]. Отдельные результаты в рамках заявленной проблематики получены автором в [12–14]. Общая схема вложения рассматриваемых дискретных пространств с неархимедовами метриками в локально компактные пространства и задание на этих пространствах регулярной меры (Хаара), последовательно ассоциированной с последовательностью анализируемых данных и адаптивно выбранной системой счисления, рассматривается в третьем разделе на примере пространств с полиадической метрикой.

Локальная линейная разделимость классов в пространствах с *p*-адической метрикой

Определение 1. *Пусть* $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2,\ \Omega_1, \Omega_2 \subset \mathbb{Z}^n$ *— два конечных непересекающихся множества,* $D = D^1 \cup D^2,\ D^1 \cap D^2 = \varnothing$ *— конечное множество p-адических метрик [15]. Будем говорить, что множества* Ω_1 *и* Ω_2 *локально линейно разделимы относительно семейства метрик* D*, если существует такая гиперплоскость*

$$L^*(\boldsymbol{z}) = A_0 + \sum_{j=1}^{n} A_j z_j = 0,$$
$$\boldsymbol{z} = (z_1, \ldots, z_n) \in \mathbb{Z}^n,$$

что для любой точки $\boldsymbol{x} \in \Omega_i,\ i = 1, 2$ *существует такая метрика* $D_p \in D^i$*, что* $D_p(L^*(\boldsymbol{x}), \mathbf{0}) < p^{-1}$*, а для любой точки* $\boldsymbol{y} \in \Omega \backslash \Omega_i$ *и любой метрики* $D_p \in D^i$ *выполняется неравенство* $D_p(L^*(\boldsymbol{y}), \mathbf{0}) \geqslant 1$*.*

Теорема 1. *Любые два конечных непересекающихся множества* $\Omega_1, \Omega_2 \subset \mathbb{Z}^n$ *локально линейно разделимы относительно некоторого семейства p-адических метрик* D*.*

Основой доказательства Теоремы 1 является следующее вспомогательное утверждение.

Лемма 2. *Пусть* $\Omega_1, \Omega_2 \subset \mathbb{Z}^n$ *— два конечных непересекающихся подмножества целочисленной решетки* $\mathbb{Z}^n,\ \Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2,\ \Omega_1 \cap \Omega_2 = \varnothing$ *и* $\Omega_1 = \{\boldsymbol{x}^1\}$ *— одноточечное множество. Тогда существует такое простое* p_1*, что классы* Ω_1 *и* Ω_2 *линейно разделимы относительно метрики* D_{p_1}*.*

Глобальная линейная разделимость классов в пространствах с полиадической метрикой

Лемма 3. *Функция*

$$D_q(a,b)=\sum_{m=1}^{\infty} q^m \chi_m(a,b), \quad 0<q<\tfrac{1}{2};$$

$$\chi_m(a,b)=\begin{cases}0, & \text{при } a\equiv b \pmod m,\\ 1, & \text{при } a\not\equiv b \pmod m,\end{cases}$$

определяет на $\mathbb{Z}$ *метрику.*

Топологическое пополнение кольца $\mathbb{Z}$ относительно метрики D_q приводит к кольцу, которое будем называть кольцом полиадических q-чисел (Прюфера).

Определение 2. *Пусть* $\Omega\subset\mathbb{Z}^n$ *— конечное множество и* $\Omega=\Omega_1\cup\Omega_2$, $\Omega_1\cap\Omega_2=\varnothing$. *Множества* Ω_1 *и* Ω_2 *называются полиадически линейно разделимыми гиперплоскостью*

$$L(\boldsymbol{x})=a_0+\sum_{k=1}^{n} a_k x_k=0, \quad \text{где} \quad a_k\in\mathbb{Z},$$

если существует $c>0$ *и* $q\in\left(0,\frac{1}{2}\right)$ *такие, что для любого* $\boldsymbol{x}\in\Omega_1$ *выполняется неравенство* $D_q(L(\boldsymbol{x}))<c$, *а для любого* $\boldsymbol{y}\in\Omega_2$ *выполняется неравенство* $D_q(L(\boldsymbol{y}))\geqslant c$.

Теорема 4. *Пусть* $\Omega_1,\Omega_2\subset\mathbb{Z}^n$, $\Omega_1\cap\Omega_2=\varnothing$. *Тогда существует гиперплоскость*

$$L^{**}(\boldsymbol{x})=B_0+\sum_{k=1}^{n} B_k x_k=0,$$

полиадически линейно разделяющая множества Ω_1 *и* Ω_2.

Далее, из-за ограниченности объема тезисов мы проиллюстрируем лишь схему построения теории меры и интеграла на неархимедовых пополнениях кольца целых чисел для пополнения, порожденного полиадической метрикой. Общий случай может быть получен по методу [11, гл. 2, раздел 10].

Мера и интеграл для кольца полиадических чисел

Шаг 1. Пусть $\mathbb{Z}$ — кольцо целых чисел. Рассмотрим систему множеств S^*, состоящую из идеалов (m). Доказывается, что систему S^* можно взять за полную систему окрестностей нуля аддитивной группы целых чисел $\mathbb{Z}$, причем операции сложения и умножения будут непрерывны в этой топологии, что определяет на $\mathbb{Z}$ структуру топологического кольца $\mathbb{Z}_\tau$ с недискретной топологией. По Лемме 3 функция $D_q(a,b)$ метризует $\mathbb{Z}$.

Шаг 2. Доказывается, что кольцо $\mathbb{Z}_\tau$ вполне ограничено, откуда следует, что всякая бесконечная последовательность целых чисел содержит сходящуюся (в смысле топологии кольца $\mathbb{Z}_\tau$) подпоследовательность.

Шаг 3. Назовем бесконечную последовательность целых чисел $a_1,a_2,\ldots$ нуль-последовательностью, если $\lim\limits_{n\to\infty} a_n=0$ (предел понимается в смысле топологии кольца $\mathbb{Z}_\tau$). Бесконечную последовательность целых чисел $a_1,a_2,\ldots$ назовем фундаментальной последовательностью, если для каждого натурального числа k можно найти такое натуральное число N, что при любых натуральных n и m, больших N, $a_n\equiv a_m \pmod{k!}$. Доказывается, что пространство $\mathbb{Z}_\tau$ не полно. Его пополнение стандартным образом с использованием аппарата фундаментальных последовательностей приводит к построению топологического кольца $\mathbf{G}_\tau$, которое будем называть кольцом полиадических чисел.

Шаг 4. Доказывается, что каждое полиадическое число ξ может быть представлено рядом

$$\xi=a_1+a_2 2!+a_3 3!,\ldots \quad (0\leqslant a_j\leqslant j),$$

сходящимся в смысле введенной топологии.

Шаг 5. На аддитивной группе кольца $\mathbf{G}_\tau$, как на компактной группе существует инвариантная относительно сложения мера — мера Хаара, которая может быть введена как с помощью конструкции Хаара [16], так и методом работ [9, 15].

Этого достаточно для построения теории интеграла и для вычисления плотностных характеристик тех последовательностей, априорная информация о которых порождает в общем случае те или иные метрики и меры.

Литература

[1] *Брудно А. Л.* Теория функций действительного переменного. — Москва: Наука, 1971. — 121 с.

[2] *Hensel K.* Zahlentheorie // Berlin u. Leipzig: G.G. Goescensche Verlangshandlung 1913.

[3] *Pruefer H.* Neue Beruendung der algebraische Zahlentheorie // Math. Ann., 94, 1925 — Pp. 198–243.

[4] *Neumann J. von* Zur Prueferschen Theorie der idealen Zahlen // Acta Litt. Sci. Szeged, 2, 1926 — Pp. 193–227.

[5] *Danzig D. van* Ueber topologisch homogene Kontinua // Fund. Math., 15, 1930 — Pp. 102–125.

[6] *Кубилюс Й.П.* Вероятностные методы в теории чисел. — Вильнюс: Госполитнаучиздат, 1962. — 221 с.

[7] *Линник Ю. В.* Дисперсионный метод в бинарных аддитивных задачах. — Москва: Изд-во ЛГУ, 1961. — 208 с.

[8] *Линник Ю. В.* Эргодические свойства алгебраических полей. — Москва: Изд-во ЛГУ, 1967. — 208 с.

[9] *Постников А. Г.* Введение в аналитическую теорию чисел. — Москва: Наука, 1971.

[10] *Кац М.* Статистическая независимость в теории вероятностей, анализе и теории чисел. — Москва: ИЛ, 1963. — 153 с.

[11] *Хьюитт Э., Росс К.* Абстрактный гармонический анализ. т. 1 — Москва: Наука, 1975. — 654 с.

[12] *Chernov V. M.* The "modular perceptron": A linear classes separability in the non-Archimedean features spaces // Proc. of the 10th Scand. Conf. on Image Analysis (SCIA'97), Vol. 2, Lappeenranta, 1997. — Pp. 803–808.

[13] *Чернов В. М.* Арифметические методы синтеза быстрых алгоритмов дискретных ортогональных преобразований — Москва: Физматлит, 2007. — 261 с.

[14] *Чернов В. М.* Некоторые алгебраические методы в задачах распознавания изображений. — В книге «Методы компьютерной обработки изображений» (под ред. В. А. Сойфера), Москва: Наука, 2001. — С. 275–296.

[15] *Понтрягин Л. С.* Непрерывные группы. 3-е изд.— Москва: Наука, 1973. — 519 с.

[16] *Спринджук В. Г.* Проблема Малера в метрической теории чисел. — Минск: Наука и техника, 1967. — 181 с.

[17] *Хренников А. Ю.* Неколмогоровские теории вероятностей и квантовая физика. — Москва: Физматлит, 2003. — 208 с.

[18] *Хренников А. Ю.* Законы больших чисел в неархимедовой теории вероятностей. // Изв. РАН. Сер. матем., 64:1, 2000. — С. 211–223.

Active learning with tree ensembles

Borisov A. E, Tuv E. V
alexander.borisov@intel.com
Nizhny Novgorod, Intel Corporation

In conventional machine learning, one uses only labeled data to train the model. However, often we have a data set with only a small number of labeled instances, and large amount of unlabeled ones. Often we can use unlabeled data to improve our model. In real world scenarios, labeled data can usually be obtained dynamically. However, obtaining new labels in most cases requires human effort and/or is costly. Active learning (AL) paradigm addresses label query strategy that allows a good model to be trained with relatively small number of queries. In this work we focus on so-called pool-based active learning, i. e when there is a fixed large pool of unlabeled data that we can query from. Existing methods are often based on strong assumptions of joint input/output distribution (i. e mixture of Gaussians, linearly separable input space, etc.), or use distance metrics, which makes such methods to be very susceptible to noise in input data and work poorly in high dimensionality. In addition, for many methods computational complexity scales at least quadratically with respect to number of unlabeled samples, limiting their use on large datasets. However, in real world applications data is often massive, noisy, contain irrelevant inputs, missed values, and mixed (continuous and discrete) variable types. Furthermore, in practice queries often should be arranged in batches (this is called batch AL), due to time restrictions and/or nature of query processing. Batch AL is rarely addressed by existing AL approaches. In this work we propose two new non-parametric approaches to batch active learning problem, that provide a solution for the challenges described above. We call the first one Batch Probabilistic Query-by-Committee (QBC) with Random Forests(RF). It is based on standard QBC algorithm applied to an RF ensemble, but uses randomization instead of deterministically selecting the instance with maximal utility. This algorithm achieved highest average score on WCCI 2010 active learning challenge and ranked top on one of the challenge datasets. Second approach (density-based QBC) directly tries to maximize batch diversity and utility while querying dense regions of input space, and it also shows good results similar to the first approach. Our work focuses on binary classification problems, but both methods can be directly applied to regression or multi-class problems too with minor modifications.

Introduction

Basic idea behind active learning is that a regression or classification algorithm can achieve better performance on limited data when it is allowed to choose the data for learning. In pool-based active learning, we are given a large fixed pool of unlabeled data, and are allowed to query response value for each unlabeled instance at given cost. Here we assume equal unit cost for all queries. The model is built on all labeled instances, then we query an instance that is considered the most useful, and update the model. The goal is to achieve better learning curve for a model, compared to querying labels at random. The main challenge for an AL algorithm is computing "utility" on unlabeled instances. Usual intuition behind the utility function is selecting instances in dense regions of input distribution, or in regions of low sampled density, or where there is the most "uncertainty" in the model. For a comprehensive review of AL approaches see [1]. Below we will outline the most commonly used AL approaches.

Uncertainty sampling (see [5] for example). Suppose we have a model that can report class probabilities $p_i,\ i = 1, \ldots, K$, where K is number of classes. Then all unlabeled instances are ranked according to current model uncertainty measure (for classification problem usually computed as $1 - \max(p_i)$). The next instance queried is the instance with largest uncertainty, thus avoiding the instances that are predicted with high confidence.

Query-by-committee, or QBC (see [6]). This approach first constructs an ensemble (committee) of diverse base learners, then ranks all unlabeled instance with respect to committee disagreement measure. Disagreement can be computed as entropy of predicted class probabilities over committee members, or in various other ways. Here we try to select instances that represent regions of feature space not covered by existing learners in the committee. However, methods like uncertainty sampling and QBC do not take global properties of input distribution into account, and can spend too much time querying outliers or sparsely populated regions. Density based methods (see [4] for example) try to overcome this issue by incorporating feature data density into the utility function. The resulting utility function for data point x is computed as $U(x)D(x)^p$, where $U(x)$ is expected utility, and $D(x)$ is estimated input density. Parameter p controls the influence of density factor. This encourages querying from more densely populated regions of input space.

Another approach that uses global input distribution information directly minimizes expected model generalization error (expected risk). However, expected risk can be computed in closed form only for limited class of models, like mixture of Gaussians, or SVMs. Such methods often have high computational complexity because model has to be rebuilt with each query, and utility recalculated. For an example of algorithm that solves those problems with Gaus-

Международная конференция «Интеллектуализация обработки информации» (ИОИ-8), Кипр, г. Пафос, 17–24 октября 2010 г.
International conference "Intelligent Information Processing" IIP-8, Cyprus, Paphos, October 17–24, 2010.

sian Random Fields(GRF) model, see [2]. GRF also naturally uses unlabeled data for learning (performs semi-supervised learning).

However an issue with most of the approaches described above is that they do not work with large and/or noisy data, or use very limiting assumptions on the model class. For example methods relying on any distance metrics are susceptible to curse of dimensionality (usually do not work for ¿ 10–20 features), are sensitive to feature scaling and incur additional complexity of calculating distances. Any kernel-based method like SVM and GRF, also requires correct estimation of kernel width parameter, that is in itself a complex task for high-dimensional noisy data.

As stated earlier, querying more than one instance at time (batch learning) often can greatly reduce labeling effort and computation time. For example one does not need to rebuild the model for each queried instance, and parallel labeling is possible. However, batch learning introduces additional challenge compared to single instance queries. In addition to optimizing individual queries, one must make sure that instances in the batch are diverse enough. That is the reason why greedy selection of instances with highest utility does not work. In addition batch learning algorithm should be fast enough compared to querying instances one-by-one, to be useful. Several approaches to batch learning [3], [4] also use greedy selection algorithm with modified utility criteria. In the first work, for example, authors use a linear combination of utility and diversity measures with an SVM model. Diversity for each sample measures how far it is from the other samples in the batch. The second article [4] introduces "Relevance, Diversity and Density" batch learning framework. Relevance considers individual instance utility, density promotes sampling from more populated regions of the distribution, and diversity ensures that samples within the batch are not close to each other.

But in practice, one often faces very large datasets (can contain hundreds to thousands of features and/or up to millions of instances), especially given the fact that AL deals with large amounts of unlabeled data. Also data is usually very noisy and contains categorical variables, so that approaches based on linear models or Euclidean/Mahalanobis distance metrics are not computationally feasible. This also prohibits usage of "global" methods like empirical risk minimization, because they usually rely on distance-based models like SVM or GRF. Neural Networks also rarely perform well with large and noisy data with unknown distribution. Mixture models and clustering approaches fail when data does not contain easily separable clusters. Many of perspective AL approaches, for example GRF, are not well suited for batch learning, and each query involves quadratic complexity in current number of labeled samples for model update, resulting in total cubic complexity in initial unlabeled data pool size. So most of the methods described above can only handle several thousands of samples and tens of variables, severely limiting their practical application.

In this work we propose nonparametric batch AL method using tree ensembles, that works with huge datasets and overcomes most of the problems described above. We introduce decision tree ensembles in section 2, section 3 contains detailed description of our algorithm. Then we describe successful application of our method to WCCI 2010 active learning challenge problems, that give very good representation of real life active learning tasks.

Decision tree models and tree ensembles

As stated above, to effectively deal with active learning problem one needs to impose some reasonable assumptions on joint input/output data distribution. Those assumptions are represented by particular data model. Among models used with huge, noisy and heterogeneous data, very popular choice is the decision tree — because trees are fast to learn, resistant to outliers and noise and give good predictive accuracy. Trees are usually induced in recursive greedy fashion. For each node best split (split with largest impurity reduction) is selected, then process is repeated in child nodes. For example CART algorithm described in [8] can be used. Commonly used node impurity measures are response variance (for regression) or Gini index (for classification). However trees often suffer from instability, or low predictive power if underlying data model is complex. Significant improvement over single tree models can be achieved with tree ensembles, sequential (Gradient Boosting Trees (GBT), Multiclass Logistic Regression Trees (MCLRT), Adaboost, see [8]) and parallel (Random Forest (RF), see [7]). We will briefly describe RF, because it is used extensively in our active learning algorithm. Although we use GBT model as the final predictor (using samples queried by our AL algorithm), we refer to [8] for details on GBT algorithm for multi-class case and omit it here.

The idea behind RF is to combine many diverse trees into an ensemble. This allows for more stable model, reduces over-fitting, and improves predictive accuracy over single tree. RF constructs a number of independent trees, each tree is built on a random portion (60% for example) of training (labeled) samples. Additional diversity within the tree is added via split randomization. Instead of selecting single best split from best splits on each variable like CART does, random small subset of variables is selected at each tree node($\sqrt{M}$, where M is total number of variables is commonly used setting). Then best split is selected only within this subset. Prediction from an RF model is obtained with averaging for regression, and voting (number of trees that predict each response class

are counted; then most frequent class is selected as predicted response) in classification. Random Forests are usually applied to classification problems, because combining many weak trees via averaging does not always result in better model in regression settings. RF is especially attractive for use with QBC, because it naturally introduce base learner diversity, and each tree has intrinsic prediction probability estimate, that is computed from class proportions in terminal node that the selected instance belongs to. RF can also be used to estimate various other properties of joint data distribution, such as density, outlier score, variable importance, or introducing (supervised) distance metrics.

Tree ensemble approach for active learning

Here we describe two our algorithms for batch AL. Denote N_0, N_1 counts of response classes in labeled data, $p_c = N_c/N,\ c = 1, 2$ — response class proportions in currently labeled data, i-th tree in ensemble G as $T_i = T_i(G),\ i = 1, \ldots, R$, where R is number of trees in the ensemble. Denote terminal node of i-th tree containing instance x as $T_i(x)$, and $p_{ic}(x)$ — predicted probabilities in i-th tree for x, computed as response class proportions in node $T_i(x)$. Denote same probabilities weighted with class priors

$$p'_{ic}(x) = \frac{p_{ic}(x)/p_c}{\sum_c p_{ic}(x)/p_c},\ c = 1, 2.$$

Algorithm 1. Probabilistic QBC.

1. Build an RF ensemble G (we used 700 shallow trees with depth = 2–6, depending on current labeled data size).
2. For each sample, compute committee disagreement $q(x) = sd\big(p'_{ic}(x)\big)$ as standard deviation of weighted rare class probability among ensemble trees (by rare class we mean the response class with smallest proportion in available labeled data). Then sort all remaining unlabeled instances with respect to $q(x)$, so that $q(x_1) > \cdots > q(x_{n_u})$, where n_u is the number of remaining unlabeled instances.
3. Sample the next batch randomly from $x_1, \ldots, x_{\alpha n_u}$. Parameter α controls discarded fraction of unlabeled instances, and indirectly introduces tradeoff between randomness and high utility. We set $\alpha = 2/3$ in our experiments. Sampling probabilities are computed from utility scores as following. Denote threshold $q_0 = q(x_{\alpha n_u})$, and $L(x) = \big(q(x) - q_0\big)/\big(q(x_1) - q_0\big)$. Then sampling probability of instance x is computed as

$$p_{sel}(x) = L(X) \Big/ \sum_x L(X).$$

4. Sample the batch from remaining unlabeled instances with computed sampling probabilities. Rebuild model G and return to step 2 (until no unlabeled instances are left in the pool).

This method addresses both uncertainty score and input density (as random sampling selects more instances from dense regions of input distribution). At the same time we enforce within batch diversity through randomization. Our implementation of step 3 of the algorithm 1 uses rejection sampling to avoid quadratic complexity in number of unlabeled instances. More specifically, sampling one unlabeled instance for the next batch requires recomputing sampling probabilities for all unlabeled instances. To avoid this, we sample each instance with unchanged probabilities (this requires one binary search, i.e $O(\log n_u)$ complexity), but reject duplicate instances. When number of rejected instances becomes large compared to number of successfully sampled instances, we just select remaining instances with the highest probabilities. Our second approach directly addresses diversity and density in a way similar to [3]. Suppose we ran all labeled and unlabeled data through RF model G (resulting in each instance being assigned to a terminal node for each tree). Denote labeled data count in a node T as $l(T)$, and total count in node as $s(T)$. Then we can estimate expected proportion $d(x)$ of labeled instance density to the total density in the neighborhood of instance x as

$$d(x) = \sum_{i=1}^{R} l\big(T_i(x)\big) \Big/ \sum_{i=1}^{R} s\big(T_i(x)\big).$$

Inverse proportion of labeled instances in the neighborhood can be used instead of local density as a multiplier for utility measure, because it promotes both queries in dense regions, and in regions with few labeled points. Below is the detailed description of algorithm using this modified utility function.

Algorithm 2. Local density based QBC.

1. Build an RF ensemble G.
2. Compute $l(x) = \sum_{i=1}^{R} l\big(T_i(x)\big),\ s(x) = \sum_{i=1}^{R} s\big(T_i(x)\big)$ for each unlabeled instance.
3. Compute modified utility score $q'(x) = q(x)/d(x) = q(x)s(x)/l(x)$ for all unlabeled data. Then sort all remaining instances with respect to $q'(x)$, so that $q'(x_1) > \cdots > q'(x_{n_u})$. Initialize query count $Q = 0$.
4. Select an instance with highest value of $q'(x)$ from $x_1, \ldots, x_{n_0}$, where $n_0 \ll n_u$ is a predefined number of lookup instances (we set $n_0 = \min(1000, n_u)$).
5. Mark it as labeled and propagate through all trees in G (resulting in updated counts $l\big(T_i(x)\big)$ in each tree). Increase Q.
6. If $Q < Q_0$, where Q_0 is predefined number of queries that can be done without new sorting

(say 20–50), then return to step 4. Else return to step 3 (do sorting again).

7. Rebuild model G and return to step 2.

Additional tricks in steps $4, 5$ are introduced to avoid sorting unlabeled instances with respect to utility score after each query. Reasonable values for Q_0 and N_0 can prevent high time complexity in number of unlabeled instances, while selecting top scored instances with respect to utility. Computation of $q(x)/l(x)$ in step 4 has complexity $O(RD)$ where D is maximum tree depth, as $q(x)$ are never updated. However, as tree depth is small (this is important for more robust estimation of $q(x)$ and $d(x)$), this is not a major problem.

We applied both our algorithms to twelve the WCCI 2010 AL challenge datasets (six development datasets which were bigger in average, and six test datasets). Below we briefly describe challenge datasets and ranking measure. Data came from diverse real world domains, for example marketing, ecology, text processing. Biggest datasets in development group were (16969×9733), (216×72626), where first number is the number of features, and second is number of instances in training data. Biggest test datasets were (92×17535), (12000×10000) and (12×67628). Also four of the development datasets had very unbalanced response distribution (1.8%–6.15% proportion of rare class).

The task was to achieve the best learning curve while querying data in arbitrary batches and updating the model after each query. The score was estimated as an area under the learning curve (model error versus number of labels queried), after all unlabeled instances are queried. X-axis (number of labels) was $\log_2$-scaled to favor good performance on small number of labeled instances. Model error was calculated as the area under ROC curve (AUC), to account for unbalanced class distribution. Response was binary in all problems. Model error was estimated on separate test data, that had the same size as the training data, but with unknown labels. For detailed description, see challenge site *http://www.causality.inf.ethz.ch/activelearning.php*.

On test datasets both proposed AL approaches performed significantly better than random sampling, uncertainty sampling, or QBC in several experiments. But because of small rare class proportion, model error variation is very high, especially on small number of labeled samples, so to provide statistically significant comparison to other methods (or between both approaches described) we need to perform additional experiments on simulated datasets. However our first algorithm (probabilistic QBC), has top average rank on all six test datasets and had first rank on one of the datasets. We chose to apply the first algorithm because of it's simplicity, and it proved to be more robust for very unbalanced classes.

Our active learning strategy is very fast. It has the same asymptotic computational complexity as building an RF model, i. e $O\big(TN\log(N)\log(M)\big)$, where T is number of trees, M is number of features, N is number of samples. Total run time (for any of two algorithms) on all six development or test datasets on one machine is approximately 6–8 hours (Zeon workstation 3 GHz with 4 GB RAM, 2 processors with hyperthreading, Windows XP system) depending on model optimization settings.

Conclusions

In this work we introduced novel approach for pool-based batch active learning using tree ensembles. We described two algorithms for batch selection that optimize both query utility function and within batch diversity. Both algorithm are very fast, and can work with very large datasets. Both methods were successfully applied to real datasets from WCCI 2010 AL challenge. However, we are going to perform more experiments on artificial datasets where underlying joint distribution is known, to investigate relative strengths and weaknesses of proposed approaches, and compare them to other AL methods. Also we consider applying some form of semi-supervised learning (for example with auto-regressive trees or Gaussian Random Field models in tree terminal nodes) — because now we do not use unlabeled data for learning in any way. Results of some participants on WCCI 2010 challenge shown that on some datasets, one can benefit from semi-supervised learning a lot.

References

[1] *Settles B.* Active Learning Literature Survey // Computer Sciences Technical Report, No. 1648. — 2009. — `http://pages.cs.wisc.edu/~bsettles/pub/settles.activelearning_20090109.pdf`

[2] *Zhu Xi., Lafferty J., Ghahramani Z.* Combining active learning and semi-supervised learning using Gaussian fields and harmonic functions // ICML 2003 workshop on The Continuum from Labeled to Unlabeled Data in Machine Learning and Data Mining, — Pp. 58–65.

[3] *Brinker K.* Incorporating Diversity in Active Learning with Support Vector Machines // Proc. of ICML-20. AAAI Press, 2003. — Pp. 59–66.

[4] *Xu Z., Akella R., and Zhang Y.* Incorporating diversity and density in active learning for relevance feedback // Proc. of ECIR. Springer-Verlag, 2007. — Pp. 246–257.

[5] *Lewis D. D. and Gale W. A.* A sequential algorithm for training text classifiers // SIGIR-17, 1994. — Pp. 3–12.

[6] *Seung H. S., Opper M., Sompolinsky H.* Query by committee // Proc. of COLT-5, 1992. — Pp. 287–294.

[7] *Breiman L.* Random Forests // Machine Learning. — 2001. — Vol. 45, No. 1. — Pp. 5–32.

[8] *Hastie T., Tibshirani R., Friedman J.* The Elements of Statistical Learning. — Springer, 2007.

Bayesian logistic regression for classification of tabular data*

Kropotov D., Vetrov D., Wolf L., Hassner T.
dmitry.kropotov@gmail.com, vetrovd@yandex.ru, wolf@cs.tau.ac.il, hassner@openu.ac.il
Moscow, Russia, Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow State University;
Tel-Aviv, Israel, Tel-Aviv University, The Open University of Israel

We extend the Relevance Vector Machine (RVM) framework to handle cases of table-structured data, i. e. when each object is represented by a table of features rather than by a single vector. This is achieved by coupling the regularization coefficients of rows and columns of features. We present two variants of this new gridRVM framework, based on the way in which the regularization coefficients of the rows and columns are combined. Appropriate variational optimization algorithms are derived for inference within this framework. The consequent reduction in the number of parameters from the product of the table's dimensions to the sum of its dimensions allows for better performance in the face of small training sets, resulting in improved resistance to overfitting problems, as well as providing better interpretation of results. These properties are demonstrated on a synthetic data-set as well as on a modern and challenging visual identification benchmark.

In classical machine learning theory, a training set consists of a number of objects (precedents), each represented as a vector of features. This is not, however, always an optimal representation. In some cases, a tabular representation is more convenient. Objects are then described by a number of features that form a table rather than a single vector.

A natural example of such case arises in a region/descriptor-based framework for image analysis. Within this framework, an image is split into several regions (blocks) and a set of descriptors is then computed for each region. Then, we may associate each feature with the pair region/descriptor and form a tabular view of a single image. Note that often the number of features extracted from the image exceeds the number of images in the whole training set, resulting in increased risk of overfitting.

Another example is related to the use of radial basis functions (RBF) in classification algorithms. Traditionally, RBF depends only on the distance $\rho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}_m)$ between the object $\boldsymbol{x}$ and some predefined point $\boldsymbol{y}_m$ in the space of features $\mathbb{R}^d$, i. e. $\varphi_m(\boldsymbol{x}) = f\big(\rho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}_m)\big)$, $m = 1, \ldots, M$. Each object is described by a vector of M RBF values. Gaussian RBFs $\varphi_m(\boldsymbol{x}) = \exp(-\gamma\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_m\|^2)$ are a popular "rule-of-thumb" choice in many classification algorithms, e. g. in logistic regression. The obvious drawback of Gaussian RBFs is their low discriminative ability in the presence of numerous noisy features. To deal with noisy features one might consider basis functions consisting of a single feature $\varphi_{mj}(\boldsymbol{x}) = f\big(|x(j) - y_m(j)|\big)$. Although it is possible to represent an object $\boldsymbol{x}$ as a vector $(\varphi_{11}(\boldsymbol{x}), \ldots, \varphi_{M,d}(\boldsymbol{x}))$, it could be more natural to form a table of M columns and d rows.

The tabular representation of data provides new options in analyzing feature sets. In particular, we may search for relevant columns and rows instead of searching for relevant features. Besides, we will show that in some cases tabular data classifier has better generalization properties compared to analogous feature vector classifier.

GridRVM models

Consider a two-class classification problem with tabular data. Let $(X, \boldsymbol{t}) = \{\boldsymbol{x}_n, t_n\}_{n=1}^N$ be the training set where $t_n \in \{-1, 1\}$ are class labels and each object $\boldsymbol{x}_n$ is represented as a table of generalized features $\big(\varphi_{ij}(\boldsymbol{x}_n)\big)_{i,j=1}^{M_1,M_2}$. Note that we will also use one-index notation $(\varphi_k(\boldsymbol{x}_n))_{k=1}^M$, $M = M_1 M_2$ when we need to treat the description of the object as a vector and denote $\Phi = \{\varphi_k(\boldsymbol{x}_n)\}_{k,n=1}^{M,N}$. Define the following probabilistic model (p-gridRVM):

$$p(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \,|\, X) = p(\boldsymbol{t} \,|\, X, \boldsymbol{w}) p(\boldsymbol{w} \,|\, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\alpha}) p(\boldsymbol{\beta}),$$

$$p(\boldsymbol{t} \,|\, X, \boldsymbol{w}) = \prod_{n=1}^N \sigma\big(t_n \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_n)\big),$$

$$p(\boldsymbol{w} \,|\, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{\prod_{i,j=1}^{M_1,M_2} \sqrt{\alpha_i \beta_j}}{\sqrt{2\pi}^{M_1 M_2}} \exp\left(-\tfrac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{M_1,M_2} \alpha_i \beta_j w_{ij}^2\right), \quad (1)$$

$$p(\boldsymbol{\alpha}) = \prod_{i=1}^{M_1} \mathcal{G}(\alpha_i \,|\, a_0, b_0),\ p(\boldsymbol{\beta}) = \prod_{j=1}^{M_2} \mathcal{G}(\beta_j \,|\, c_0, d_0),$$

where $\sigma(y) = 1/\big(1 + \exp(-y)\big)$ is a logistic function, $\mathcal{G}(\alpha_i \,|\, a_0, b_0)$ stands for gamma distribution over α_i with parameters a_0, b_0 and all $\alpha_i, \beta_j \geqslant 0$. The p-gridRVM model differs from the conventional RVM model only in (1), where instead of individual regularization coefficient α_{ij} for each weight w_{ij} we assign independent regularization coefficients to each row and column of the tabular presentation. The regularization coefficient for the weight w_{ij} is a product of α_i and β_j. Alternatively, we may consider the sum, i. e.

$$p(\boldsymbol{w} \,|\, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{\prod_{i,j=1}^{M_1,M_2} \sqrt{\alpha_i + \beta_j}}{\sqrt{2\pi}^{M_1 M_2}} \exp\left(-\tfrac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{M_1,M_2} (\alpha_i + \beta_j) w_{ij}^2\right).$$

The work is supported by the Russian Foundation for Basic Research (project No. 09-01-92474) and Ministry of Science, Culture and Sport, State of Israel (project No. 3-5797).

We refer to this model as s-gridRVM. Note that in both introduced models the number of regularization coefficients $\boldsymbol{\alpha}$ and $\boldsymbol{\beta}$ is M_1+M_2 while the number of weights is M_1M_2. However, they have one important distinction. In s-gridRVM large value of α_i means that all features from the ith row have regularization coefficients at least as large as α_i, while in p-gridRVM large α_i does not necessarily imply large values of the regularization coefficient for a weight w_{ij} since the coefficient β_j may have a small value. Thus we may expect a different behavior from these models.

Variational learning in gridRVM models

In a classification problem we wish to calculate

$$p(t_{\text{new}} \,|\, \boldsymbol{x}_{\text{new}}, \boldsymbol{t}, X) = \int p(t_{\text{new}} \,|\, \boldsymbol{x}_{\text{new}}, \boldsymbol{w}) \times p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \,|\, \boldsymbol{t}, X)\, d\boldsymbol{w}\, d\boldsymbol{\alpha}\, d\boldsymbol{\beta} \quad (2)$$

for any new object $\boldsymbol{x}_{\text{new}}$. For models p- and s-gridRVM this integration is intractable and hence some approximation scheme is needed. Here we use the variational approach [1], which has been successfully applied for the conventional RVM model in [3], and try to find a variational approximation $q(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ to the true posterior $p(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \,|\, \boldsymbol{t}, X)$ in the following family of factorized distributions:

$$q(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}) q_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha}) q_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta}).$$

Then (2) can be reduced to integration over the factorized distribution q:

$$p(t_{\text{new}} | \boldsymbol{x}_{\text{new}}, \boldsymbol{t}, X) \simeq \int p(t_{\text{new}} | \boldsymbol{x}_{\text{new}}, \boldsymbol{w}) q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}) d\boldsymbol{w}. \quad (3)$$

Using the Jaakkola-Jordan inequality [1] for the likelihood function $p(\boldsymbol{t} \,|\, X, \boldsymbol{w})$, we obtain:

$$p(\boldsymbol{t} \,|\, X, \boldsymbol{w}) \geqslant F(\boldsymbol{t}, X, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\xi}) = \prod_{n=1}^{N} \sigma(\xi_n) \exp\Big(\frac{z_n - \xi_n}{2} - \lambda(\xi_n)(z_n^2 - \xi_n^2) \Big),$$

where $\lambda(\xi) = \tanh(\xi/2)/(4\xi)$, $z_n = t_n \boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_n)$. This bound is tight for $\xi_n = z_n$. Then it can be shown that

$$\log p(\boldsymbol{t} \,|\, X) \geqslant \int \log \frac{F(\boldsymbol{t}, X, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\xi}) p(\boldsymbol{w} \,|\, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\alpha}) p(\boldsymbol{\beta})}{q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}) q_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha}) q_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta})} \times q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w})\, q_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha})\, q_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta})\, d\boldsymbol{w}\, d\boldsymbol{\alpha}\, d\boldsymbol{\beta}. \quad (4)$$

From the theory of variational inference [1], it follows that maximization of the criterion function (4) w. r. t. distributions $q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w})$, $q_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha})$, $q_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta})$ and variational parameters $\boldsymbol{\xi}$ leads to the following result:

$$q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{w} \,|\, \boldsymbol{\mu}, \Sigma), \quad (5)$$

$$q_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha}) = \prod_{i=1}^{M_1} \mathcal{G}(\alpha_i \,|\, a_i, b_i), \quad q_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta}) = \prod_{j=1}^{M_2} \mathcal{G}(\beta_j \,|\, c_j, d_j),$$

where each distribution is iteratively updated with all others fixed by the following formulae:

$$\Sigma = \left(\operatorname{diag}(\mathsf{E}_{\boldsymbol{\alpha}}\alpha_i \mathsf{E}_{\boldsymbol{\beta}}\beta_j) + 2\Phi^{\mathsf{T}}\Lambda\Phi\right)^{-1},$$

$$\Lambda = \operatorname{diag}\big(\lambda(\xi_n)\big), \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2}\Sigma\Phi^{\mathsf{T}}\boldsymbol{t},$$

$$a_i = a_0 + \frac{M_2}{2}, \quad b_i = b_0 + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{M_2} \mathsf{E}_{\boldsymbol{\beta}}\beta_j \mathsf{E}_{\boldsymbol{w}} w_{ij}^2,$$

$$c_j = c_0 + \frac{M_1}{2}, \quad d_j = d_0 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M_1} \mathsf{E}_{\boldsymbol{\alpha}}\alpha_i \mathsf{E}_{\boldsymbol{w}} w_{ij}^2,$$

$$\xi_n^2 = \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{x}_n) \mathsf{E}_{\boldsymbol{w}} \boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_n).$$

The necessary statistics are calculated as follows:

$$\begin{array}{ll} \mathsf{E}_{\boldsymbol{w}}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{\mu}, & \mathsf{E}_{\boldsymbol{\alpha}} \log \alpha_i = \Psi(a_i) - \log b_i, \\ \mathsf{E}_{\boldsymbol{w}} w_{ij}^2 = \Sigma_{ij,ij} + \mu_{ij}^2, & \mathsf{E}_{\boldsymbol{\beta}}\beta_j = \frac{c_i}{d_i}, \\ \mathsf{E}_{\boldsymbol{\alpha}}\alpha_i = \frac{a_i}{b_i}, & \mathsf{E}_{\boldsymbol{\beta}} \log \beta_j = \Psi(c_j) - \log d_j, \end{array} \quad (6)$$

where $\Psi(a) = \frac{d}{da}\log\Gamma(a)$ — digamma function.

For learning in s-gridRVM model we propose a new variational bound:

$$\log(x+y) \geqslant \log(\eta+\zeta) + \frac{\eta\big(\log(x) - \log(\eta)\big) + \zeta\big(\log(y) - \log(\zeta)\big)}{\eta+\zeta}, \quad (7)$$

where η and ζ are variational parameters. This bound is tight when $x/y = \eta/\zeta$ and illustrated in Fig. 1. The inequality (7) leads to the following lower bound on $\log p(\boldsymbol{w} \,|\, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$:

$$\log p(\boldsymbol{w} \,|\, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{M_1,M_2} [\log(\alpha_i + \beta_j) - (\alpha_i + \beta_j) w_{ij}^2] - \frac{M_1 M_2}{2}\log 2\pi \geqslant \log G(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\zeta}) =$$

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{M_1,M_2} \Bigg[\log(\eta_{ij} + \zeta_{ij}) + \frac{\eta_{ij}\big(\log(\alpha_i) - \log(\eta_{ij})\big)}{\eta_{ij} + \zeta_{ij}} + \frac{\zeta_{ij}\big(\log(\beta_j) - \log(\zeta_{ij})\big)}{\eta_{ij} + \zeta_{ij}} - (\alpha_i + \beta_j) w_{ij}^2 \Bigg] - \frac{M_1 M_2}{2}\log 2\pi.$$

This bound is tight, e. g. if $\eta_{ij} = \alpha_i$ and $\zeta_{ij} = \beta_j$. Maximization of the criterion function

$$\log p(\boldsymbol{t} \,|\, X) \geqslant \int \log \frac{F(\boldsymbol{t}, X, \boldsymbol{w}, \boldsymbol{\xi}) G(\boldsymbol{w}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\zeta}) p(\boldsymbol{\alpha}) p(\boldsymbol{\beta})}{q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}) q_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha}) q_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta})} \times q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}) q_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha}) q_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta}) d\boldsymbol{w} d\boldsymbol{\alpha} d\boldsymbol{\beta}$$

w. r. t. distributions $q_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w})$, $q_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\alpha})$, $q_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta})$ and variational parameters $\boldsymbol{\xi}$, $\boldsymbol{\eta}$, $\boldsymbol{\zeta}$ leads to (5), where

$$\Sigma = \left(\operatorname{diag}(\mathsf{E}_{\boldsymbol{\alpha}}\alpha_i + \mathsf{E}_{\boldsymbol{\beta}}\beta_j) + 2\Phi^{\mathsf{T}}\Lambda\Phi\right)^{-1},$$

$$\Lambda = \operatorname{diag}\big(\lambda(\xi_n)\big), \ \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2}\Sigma\Phi^{\mathsf{T}}\boldsymbol{t},$$

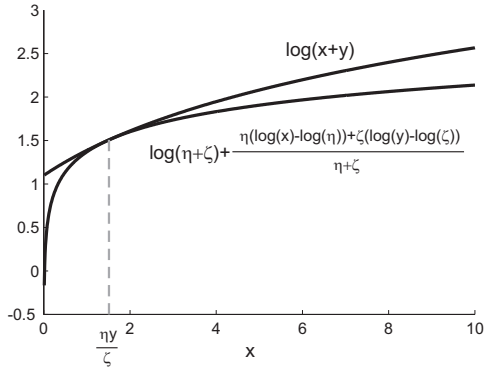


Fig. 1. One-dimensional projection of the bound (7) for parameters $y = 3,\ \eta = 2,\ \zeta = 4$.

$$a_i = a_0 + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{M_2}\frac{\eta_{ij}}{\eta_{ij}+\zeta_{ij}}, \quad b_i = b_0 + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{M_2}\mathsf{E}_{\boldsymbol{w}} w_{ij}^2,$$

$$c_j = c_0 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M_1}\frac{\zeta_{ij}}{\eta_{ij}+\zeta_{ij}}, \quad d_j = d_0 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M_1}\mathsf{E}_{\boldsymbol{w}} w_{ij}^2,$$

$$\eta_{ij} = \exp(\mathsf{E}_{\boldsymbol{\alpha}}\log\alpha_i),\ \zeta_{ij} = \exp(\mathsf{E}_{\boldsymbol{\beta}}\log\beta_j),$$

$$\xi_n^2 = \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{x}_n)\mathsf{E}_{\boldsymbol{w}}\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_n).$$

The necessary statistics are still calculated using (6).

Now return to decision making scheme (3). Using (5) the integral (3) can be rewritten as

$$\int \sigma\big(t_{\text{new}}\boldsymbol{w}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_{\text{new}})\big)\mathcal{N}(\boldsymbol{w}\,|\,\boldsymbol{\mu},\Sigma)d\boldsymbol{w} =$$

$$\int \sigma(z)\mathcal{N}\big(z\,|\,t_{\text{new}}\boldsymbol{\mu}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_{\text{new}}), \boldsymbol{\varphi}^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{x}_{\text{new}})\Sigma\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{x}_{\text{new}})\big)dz.$$

The last integral is one-dimensional and can be easily calculated using the Monte Carlo technique. The useful analytical approximation for this integral is proposed in [5]:

$$\int \sigma(z)\mathcal{N}(z\,|\,m,s^2)dz \simeq \sigma\left(m\Big/\sqrt{1+\tfrac{\pi s^2}{8}}\right).$$

Experiments

First consider an artificial classification dataset[1] taken from [4] (see Fig. 3c). This is a 2-class problem with 200 objects in the training set and 5000 objects in the test set. The feature space is two-dimensional and the data are generated from a specified distribution with Bayesian error rate 19%. The optimal discriminative surface is non-linear. In the experiment we add up to 30 normally distributed noisy features and investigate the behaviour of the conventional variational RVM [3], p-gridRVM and s-gridRVM with 3 types of basis functions. In the first case we take initial features, i. e. $\varphi_j(\boldsymbol{y}) = y(j)$ (total d features).

[1] `http://www-stat.stanford.edu/~tibs/ElemStatLearn/datasets/mixture.example.data`

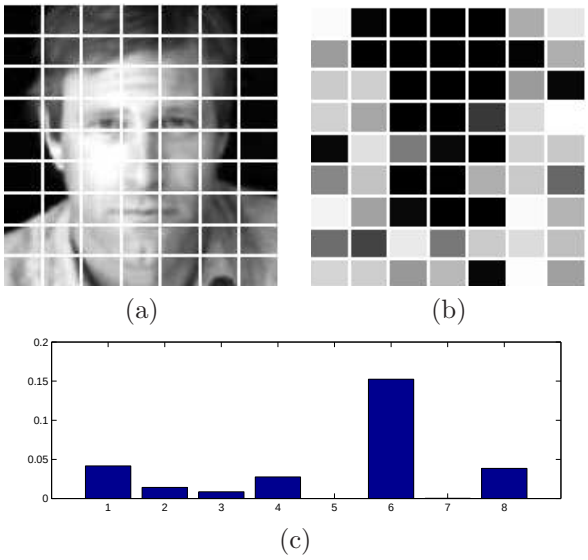


Fig. 2. Experimental results for LFW dataset. See the text for details.

This corresponds to a linear separating hyperplane. In the second case we take Gaussian RBFs of the form $\varphi_j(\boldsymbol{y}) = \exp(-\delta\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_j\|^2)$, where $\boldsymbol{x}_j$ are training objects (total N features). In the third case we take separate RBFs calculated for each dimension, i. e. $\varphi_{ij}(\boldsymbol{y}) = \exp\Big(-\delta\big(y(i)-x_j(i)\big)^2\Big)$ (total Nd features). In the first two cases we have a standard vector representation of objects, $M_2 = 1$ for both gridRVMs and hence gridRVMs are very similar to standard RVM here. In the last case we may treat objects' representation both as a matrix of size $N \times d$ for gridRVMs and as a vector of length Nd for RVM. The experimental results (error rates) are shown in figure 3 (a: initial features, b: standard RBFs, d: RBFs calculated for each dimension, color legend: light grey — RVM, black — p-gridRVM, dark grey — s-gridRVM, dotted line stands for train error, solid line — test error). In all cases $\delta = 5.55$. In the first case we have more than 27% error rate for all three methods because linear hyperplane is inadequate for this nonlinear data. For the second case all methods show similar performance and quickly overfit with the addition of noisy features. However, the overfit speed for gridRVM methods is less than for RVM. In the last case, where the tabular representation of data is appropriate, gridRVM methods show stable performance resulting in 22–23% of errors even for 30 noisy features while RVM definitely overfits starting from several noisy features. The number of the relevant basis functions for the last type of basis functions is shown on fig. 3e. We can see that the s-gridRVM model gives less sparse solution compared to p-gridRVM.

We also test gridRVM approach on the Labeled Faces in the Wild (LFW) pair-matching benchmark[2].

[2] `http://vis-www.cs.umass.edu/lfw/`

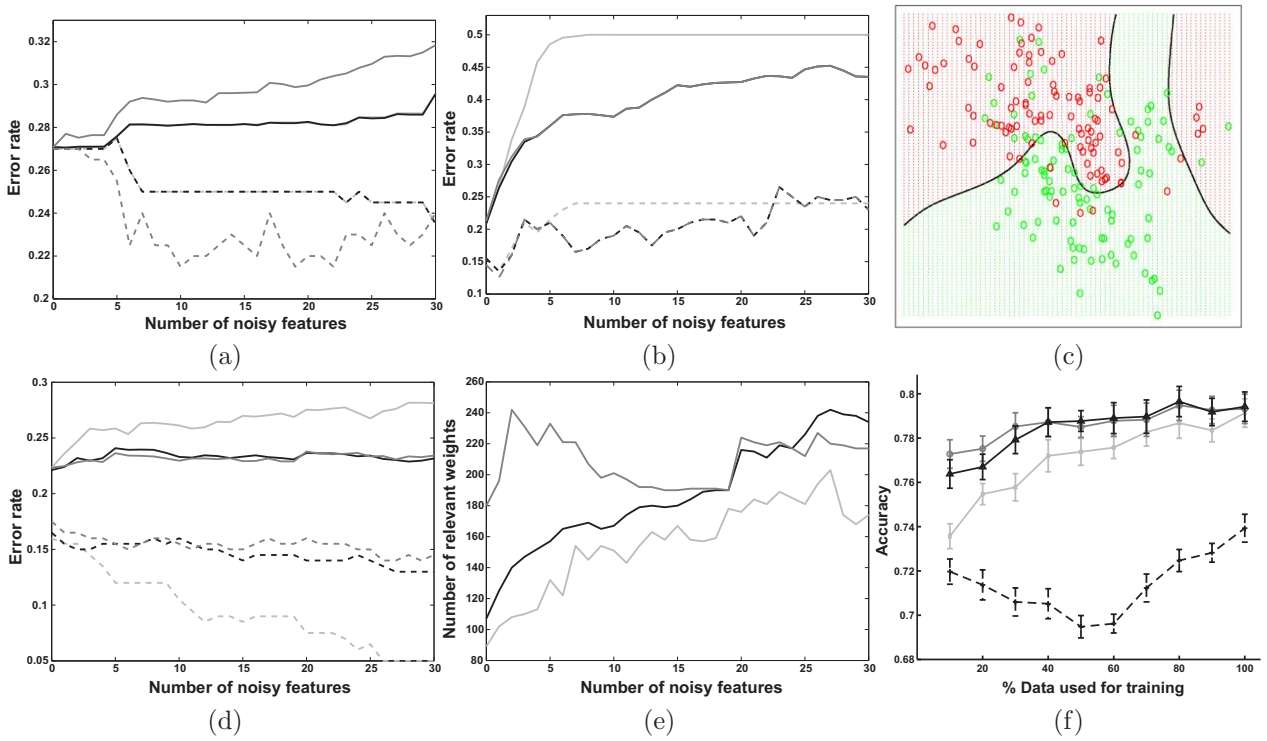


Fig. 3. Experimental results. Please see the text for details.

The LFW data set provides a set of facial images which were automatically harvested from news websites and thus present faces under challenging, unconstrained viewing conditions. The goal of the benchmark is to determine, given a pair of images from the collection, whether the two images match (portray the same subject) or not.

We represent the images in the following way. Each face image was subdivided into 63 non-overlapping blocks of 23×18 pixels centered on the face (see Fig. 2a) and for each block a set of values was calculated using Local Binary Patterns approach [6]. We used four different LBPs and thus four different feature vectors for each block. Each pair of images to be compared is represented by one table of similarity values. The rows of the tables correspond to similarities values, calculated using particular LBP type and particular distance function (we used two variants – Euclidian and Hellinger distance) and the columns correspond to the 63 facial blocks.

We report our results in Fig. 3f where the pair-matching performance of s-gridRVM (dark grey) and p-gridRVM (black) is compared against two baseline methods — RVM (light grey) and linear SVM (dotted black). As can be seen, the gridRVM methods show a clear advantage over both baseline methods. This is particularly true when only a small amount of training data is available. Although this advantage diminishes as more training is made available, both grid methods remain superior. Note that the results improve the ones reported in [2], where the same features were used for the whole image and the reported (best at that time) accuracy was 78.47%. P-gridRVM and s-gridRVM showed 79.34% and 79.42% of correct answers respectively.

GridRVM approach allows us to analyze relevant rows and columns in object's tabular representation. In the context of face images this corresponds to relevant blocks and relevant descriptors (LBPs + distance types). Fig. 2b shows the block relevance (the darker the more informative) and Fig. 2c shows the relevance of descriptors (inverse regularization coefficient).

References

[1] *Jaakkola T., Jordan M.* Bayesian parameter estimation through variational methods // Statistics and Computing. — 2000. — Vol. 10. — Pp. 25–37.

[2] *Wolf L., Hassner T., Taigman Y.* Descriptor based methods in the wild // ECCV workshop on Faces in Real-Life Images: Detection, Alignment, and Recognition. — 2008.

[3] *Bishop C., Tipping M.* Variational relevance vector machine // Proc. of the 16-th Conf. on Uncertainty in Artificial Intelligence. — 2000. — Pp. 46–53.

[4] *Friedman J., Hastie T., Tibshirani R.* The elements of statistical learning. — New York: Springer, 2001.

[5] *MacKay D.* Bayesian interpolation // Neural Computation. — 1992. — Vol. 4, No. 3. — Pp. 415–447.

[6] *Ahonen T., Hadid A., Pietikäinen M.* Face description with local binary patterns: application to face recognition // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. — 2006. — Vol. 28, No. 12. — Pp. 2037–2041.

Integral indicators based on data and rank-scale expert estimations*

Vadim Strijov, Peter Letmathe
strijov@ccas.ru, peter.letmathe@uni-siegen.de
Computing Center of the Russian Academy of Sciences, Russia
Universität Siegen, Germany

Integral indicators play important role in decision making. To make a balanced decision one needs measured data and expert estimations. The expert estimations may contradict the data. Below we investigate a method of integral indicator construction. It uses rank-scaled expert estimations and resolves the possible contradiction between the estimations and the data.

Introduction

To compare objects or alternative decisions one must evaluate a value of quality or a measure of performance for each object. This real-valued scalar is called the integral indicator. Expert estimations of one expert or an expert group could be indicators [1, 2]. Also data could be used to calculate indicators as a convolution of object features [3, 4].

To construct an integral indicator one must perform the following steps. First, select a quality criterium or a comparison criterium for objects. Collect the set of comparable objects. Collect the set of features to describe the objects. Then fulfill the "object-feature" design matrix. We suppose the matrix has no outliers and empty values. The features of the design matrix have a unified linear scale and do not have significant cross-correlation coefficients [5, 6].

Let us state the problem of indicator construction. The design matrix $A = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^{m,n}$, $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ is given. An element a_{ij} of the matrix is j-th feature measurement for i-th object.

The integral indicator of the object is the linear combination

$$q_i = \sum_{j=1}^{n} w_j g_j(a_{ij}), \qquad (1)$$

where g_j is the normalizing function

$$g_j : a_{ij} \mapsto (-1)^{s_j} \frac{a_{ij} - \min\limits_i a_{ij}}{\max\limits_i a_{ij} - \min\limits_i a_{ij}} + s_j. \qquad (2)$$

This function keeps the principle "the bigger the better". According to this principle an object with bigger value of some feature has the better indicator. The modifier s_j is assigned to one if the optimal value of j-th feature must be minimal and to zero if the optimal value of the feature must be maximal. If the denominator of (2) equals zero for some j, then j-th feature must be withdrawn from the design matrix A.

If the condition (2) holds then the indicator $\mathbf{q} = A\mathbf{w}$, where the indicator $\mathbf{q} = \langle q_1, \dots, q_m\rangle^\intercal$ and the vector of the weights $\mathbf{w} = \langle w_1, \dots, w_n\rangle^\intercal$. Let $\mathbb{R}^m \ni \mathbf{q}$ be the space of objects and $\mathbb{R}^n \ni \mathbf{w}$ be the space of features. To construct the integral indicator (1) we must find the weights of given features.

List some obvious methods that use the model (1) and design matrix subject to (2).

1. The indicator q_i is the distance from i-th object to the object with the best features

$$q_i = \frac{1}{m}\left(\sum_{j=1}^{n}\Big(a_{ij} - \max_{\xi=1,\dots,m} a_{\xi j}\Big)^r\right)^{\frac{1}{r}},$$

where the parameter r defines the distance function.

2. The indicator $\mathbf{q}_{\mathrm{PCA}} = A\mathbf{w}_{1\mathrm{PC}}$ is the projection of the row vectors of the matrix A to the first principal component [7, 8], where $\mathbf{w}_{1\mathrm{PC}}$ is the first row of the matrix W defined by the singular values decomposition $A^\intercal A = W\Lambda^2 W^\intercal$.

3. The indicator $\mathbf{q}_1 = A\mathbf{w}_0$, is the linear combination of the columns of the matrix A, where $\mathbf{w}_0$ are the linear-scaled expert estimations of weights. The lower index 0 signals that the estimation was given by the expert.

4. The indicator $\mathbf{q}_{\mathrm{ESM}} = A\mathbf{w}_1$, where $\mathbf{q}_0$ are the linear-scaled expert estimations of indicators and

$$\mathbf{w}_1 = \arg\min_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^n} \|A\mathbf{w} - \mathbf{q}_0\|^2.$$

The solution of this optimization problem is $\mathbf{w}_1 = (A^\intercal A)^{-1}A^\intercal\mathbf{q}_0$. Denote by $\|\cdot\|$ the Euclidian norm.

Concordance of linear-scaled expert estimations

Let the indicators $\mathbf{q}_1 = A\mathbf{w}_0$ are obtained using the expert estimations of feature weights $\mathbf{w}_0$. Let the feature weights $\mathbf{w}_1 = A^+\mathbf{q}_0$ be obtained using the expert estimations of indicators $\mathbf{q}_0$. Obtain the pseudo-inverse linear operator A^+ using the singular values decomposition [9, 10] of the matrix A,

$$A^+ = W\Lambda U^\intercal.$$

The linear operator A maps the vector of expert estimations of weights $\mathbf{w}_0$ to the vector $\mathbf{q}_1$. The pseudo-inverse linear operator A^+ maps the vector of the expert estimation of indicators $\mathbf{q}_0$ to the vector $\mathbf{w}_1$. In the general case the estimated and the mapped vectors are different: $\mathbf{q}_1 \neq \mathbf{q}_0$ and $\mathbf{w}_1 \neq \mathbf{w}_0$.

The project is supported by RFBR grant 10-07-00422.

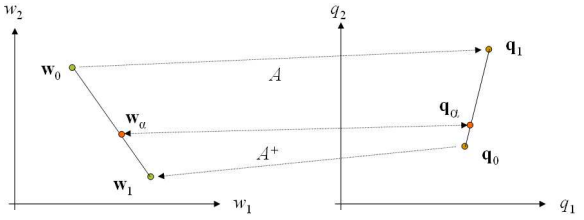


Fig. 1. Concordant vectors $\mathbf{w}_\alpha \in [\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_0]$ and $\mathbf{q}_\alpha \in \in [\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_0]$.

To resolve this contradiction we suggest to use the concordant estimations, see Fig. 1:

$$\mathbf{w}_\alpha \in [\mathbf{w}_0, \mathbf{w}_1] \quad \text{and } \mathbf{q}_\alpha \in [\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_0]. \tag{3}$$

The vectors $\mathbf{w}_\alpha, \mathbf{q}_\alpha$, given α, are defined by the equation

$$\begin{array}{rcl} \mathbf{w}_\alpha & = & \alpha\mathbf{w}_0 + (1-\alpha)A^+\mathbf{q}_0; \\ \mathbf{q}_\alpha & = & (1-\alpha)\mathbf{q}_0 + \alpha A\mathbf{w}_0. \end{array} \tag{4}$$

This equation brings the concordant expert estimations. They satisfy the condition (6). The structural parameter α defines preference of the expert estimations. When $\alpha \to 0$ one prefers the expert estimations of indicators. When $\alpha \to 1$ one prefers the expert estimations of weights. The structural parameter α could be assigned by the expert himself or could be defied as

$$\hat{\alpha} = \arg\min_{\alpha\in[0,1]} \frac{\|\mathbf{w}_0 - \mathbf{w}_\alpha\|}{n} + \frac{\|\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}_\alpha\|}{m}. \tag{5}$$

Withdrawn the condition (3) and find the concordant estimations in the neighborhood of the vectors $\mathbf{w}_0, \mathbf{q}_0$ (see Fig. 2). Solve the optimization problem (5) with the regularizaion parameter γ^2. Rewrite this problem as

$$\mathbf{w}_\gamma = \arg\min_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^n} (\varepsilon^2 - \gamma^2\delta^2),$$

where $\varepsilon^2 = \|\mathbf{w} - \mathbf{w}_0\|^2$ and $\delta^2 = \|A\mathbf{w} - \mathbf{q}_0\|^2$. The concordant expert estimations are defined by the eqsssuation

$$\mathbf{w}_\gamma = (A^\intercal A + \gamma^2 I_n)^{-1}(A^\intercal\mathbf{q}_0 + \gamma^2\mathbf{w}_0)$$

and satisfy the condition (6). The parameter γ^2 defines preference of the expert estimations of indicators versus expert estimations of weights like the parameter α.

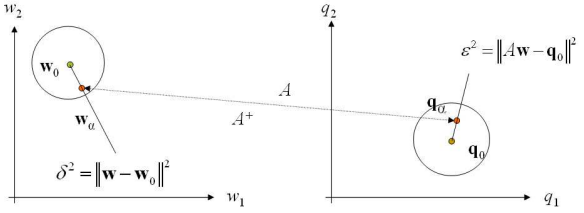


Fig. 2. The concordant vectors $\mathbf{w}_\gamma$ and $\mathbf{q}_\gamma$ are in the neighborhood of the vectors $\mathbf{w}_0$ and $\mathbf{q}_0$.

Concordance for rank-scaled expert estimations

We suppose hereby that an expert marks his estimations in the rank scales. As it was described in the previous section, there are two types of indicators: estimated $\mathbf{q}_0$ and calculated $\mathbf{q}_1 = A\mathbf{w}_0$. In the general case these indicators are different, $\mathbf{q}_0 \neq \mathbf{q}_1$. The goal is to make a concordant indicator, which accounts data and rank-scaled expert estimations as well.

We call a *concordant pair* a vector $\mathbf{q}$ of indicators and a vector $\mathbf{w}$ of weights such that

$$\begin{array}{rcl} \mathbf{q} & = & A\mathbf{w}; \\ \mathbf{w} & = & A^+\mathbf{q}, \end{array} \tag{6}$$

where A^+ is a linear map, pseudo-inverse for A: $AA^+A = A$, $A^+AA^+ = A^+$ and $(AA^+)^\intercal = AA^+$ +, $(A^+A)^\intercal = A^+A$. The main problem we will solve in this paper is to modify expert estimations to hold (6).

So the expert estimations $\mathbf{q}_0, \mathbf{w}_0$ are given. Any monotonic transformation could be applied to the elements of the vectors. The design matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ is given. It satisfies the condition (2).

Without loss of generality let us consider the following order relation:

$$q_1 \geqslant \cdots \geqslant q_m \geqslant 0 \quad \text{and} \quad w_1 \geqslant \cdots \geqslant w_n \geqslant 0. \tag{7}$$

To hold this condition one must rearrange elements of the vector $\mathbf{q}_0$ and corresponding columns of the matrix A. Similar rearrangement must be performed for elements of the vector $\mathbf{w}_0$ and corresponding rows of the matrix A.

Rewrite the condition (7) as the following system of linear inequalities (show indicators only)

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \cdots \\ q_{m-1} \\ q_m \end{pmatrix} \geqslant \mathbf{0}.$$

Denote the bidiagonal matrix by J and rewrite (7) as

$$J_m\mathbf{q} \geqslant \mathbf{0} \quad \text{and} \quad J_n\mathbf{w} \geqslant \mathbf{0}.$$

The number of rows in the square matrix J equals the number of ineqiations in the system. The number of columns in J equals the number of elements in $\mathbf{q}$.

Denote by $\mathcal{Q}$ and by $\mathcal{W}$ the expert-given cones for the objects and for the features respectively.

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{Q} & = & \{\mathbf{q} \,|\, J_m\mathbf{q} \geqslant \mathbf{0}\}; \\ \mathcal{W} & = & \{\mathbf{w} \,|\, J_n\mathbf{w} \geqslant \mathbf{0}\}. \end{array} \tag{8}$$

Let the vectors $\mathbf{q}$ and $\mathbf{w}$ be elements of arbitrary cones $\mathcal{Q}$ and $\mathcal{W}$. The linear operator A maps

the cone $\mathcal{W} \ni \mathbf{w}_0$ of the expert estimations of features (8) to the cone $A\mathcal{W} = \mathcal{P} \ni \mathbf{q}_1$, see Fig. 3:

$$A : \mathcal{W} \to \mathcal{P};$$
$$A : \mathbf{w}_0 \mapsto \mathbf{q}_1.$$

Two variants of the mapping are possible.

1. The cones $\mathcal{P}$ and $\mathcal{Q}$ intersect; in this case the expert estimations are concordant: there exists a pair $\mathbf{q}_p \in \mathcal{P} \cup \mathcal{Q}, \mathbf{w}_p = A^+\mathbf{q}_p \in \mathcal{W}$, which satisfies (6).
2. The intersection of $\mathcal{P}$ and $\mathcal{Q}$ is empty, the concordance procedure is needed.

These variants are described in the following sections.

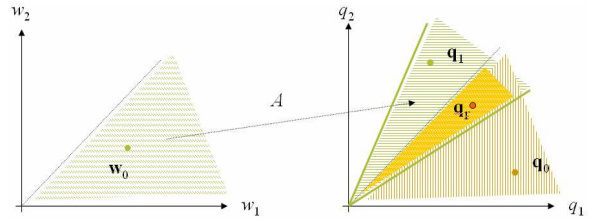


Fig. 3. The linear operator A maps the convex polyhedral cone of feature estimations to the space of indicators.

Mapping and intersection of convex polyhedral cones

Note some statements on the cone properties to justify the algorithms described below. The set of vectors $\mathcal{Q}$ in $\mathbb{R}^m$ is called a *cone*, if for any vector $\mathbf{q} \in \mathcal{Q}$ the vector $\lambda\mathbf{q}$ is also in $\mathcal{Q}$. *A convex polyhedral cone* is an intersection of the finite number of half-spaces that have a point in common. This point is called *the top of the cone*.

The convex polyhedral cone with the top in the origin of coordinates is a set of solutions of the system of linear inequalities:

$$\begin{cases} a_{11}w_1 & + & \ldots & + & a_{1n}w_n & \geqslant & 0; \\ \ldots & & \ldots & & \ldots & & \ldots \\ a_{m1}w_1 & + & \ldots & + & a_{mn}w_n & \geqslant & 0. \end{cases}$$

Thus the system of linear inequalities $J\mathbf{w} \geqslant \mathbf{0}$ defines the convex polyhedral cone.

List the following statements about mapping and intersection of convex polyhedral cones.

Statement 1. *Let two convex polyhedral cones that have the common top. The intersection of these cones is the convex polyhedral cone. It is defined by the system of linear homogenic inequalities with the matrix*

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}.$$

Statement 2. *The set $\mathcal{W}$ of all vectors $\mathbf{w} = \langle w_1, \ldots, w_n \rangle$, which satisfy the condition $w_1 \geqslant w_2 \geqslant \ldots \geqslant w_n \geqslant 0$ is the cone.*

Statement 3. *The geometric locus defined by the image of the map $A : \mathcal{W} \to \mathcal{Q}$ is the cone.*

Thus, if the set $\mathcal{W}$ is the convex polyhedral cone, then the linear operator A maps it to the convex polyhedral cone $\mathcal{P} = A\mathcal{W}$. The corresponding pseudo-inverse linear operator A^+ maps the cone $\mathcal{W}$ to the cone $A^+\mathcal{W}$.

Statement 4. *If the cones are defined in the space of indicators by the systems of linear inequalities $B_1\mathbf{q} \geqslant \mathbf{0}$ and $B_2\mathbf{q} \geqslant \mathbf{0}$ intersect, their preimages in the feature space intersect, too.*

In the context of the investigated problem, if the convex polyhedral cones $\{\mathbf{q} | J_m\mathbf{q} \geqslant \mathbf{0}\}$ and $\{\mathbf{w} | AJ_n\mathbf{w} \geqslant \mathbf{0}\}$ intersect in the space of indicators, then their preimages in the feature space $\{\mathbf{q} : A^+J_m\mathbf{q} \geqslant \mathbf{0}\}$ and $\{J_n\mathbf{w} \geqslant \mathbf{0}\}$ intersect, too. Denote by $\mathcal{W}_p = \mathcal{W} \cup A^+\mathcal{Q}$ and $\mathcal{Q}_p = \mathcal{Q} \cup A\mathcal{W}$ the intersections, mentioned above.

Statement 5. *If the cone $\mathcal{Q}_p \neq \varnothing$ then $\mathcal{W}_p \neq \varnothing$; otherwise both cones are empty.*

This statement is equivalent to the following. For each vector $\mathbf{w}_p \in \mathcal{W}_p$ there exists some concordant vector $\mathbf{q}_p \in \mathcal{Q}_p$ such that the condition (6) holds.

To find the intersection $\mathcal{Q}_p$ describe the corresponding sets with the system of linear inequalities. The set $\mathcal{Q}_p \ni \mathbf{q}_p$ is the solution of the system of linear inequalities

$$\begin{cases} J_m\mathbf{q}_0 & \geqslant & 0; \\ AJ_n\mathbf{w}_0 & \geqslant & 0. \end{cases} \tag{9}$$

The solution $\mathcal{Q}_p$ is the cone; it could be trivial.

The cones does not intersect: the concordance is needed

If the cones $\mathcal{Q}_p = \mathcal{Q} \cap A\mathcal{W} = \varnothing$ and $\mathcal{W}_p = \mathcal{W} \cap A^+\mathcal{Q} = \varnothing$, then we will use a modified α-concordance procedure. Consider two rays, defined by the vectors $\mathbf{q} \in \mathcal{Q}$ and $\mathbf{p} \in \mathcal{P} = A\mathcal{W}$. Find the nearest rays in the edges or the faces of the cones $\mathcal{Q}, \mathcal{P}$ as

$$\cos(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{q}^\mathsf{T}\mathbf{p}}{\|\mathbf{q}\|\|\mathbf{p}\|} \to \max.$$

Then apply the procedure (4) to the result vectors $\hat{\mathbf{q}}$ and $\hat{\mathbf{p}}$. To find these vectors one must solve the following optimization problem:

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & \mathbf{q}^\mathsf{T}\mathbf{p} \\ \text{subject to} & \mathbf{q}^\mathsf{T}\mathbf{q} = 1, \quad \mathbf{p}^\mathsf{T}\mathbf{p} = 1, \\ & J_n\mathbf{q} \geqslant \mathbf{0}, \quad AJ_m\mathbf{p} \geqslant \mathbf{0}. \end{array}$$

Describe an algorithm to find the vectors $\mathbf{q}^{(2k)}$ and $\mathbf{p}^{(2k+1)}$ on the even and odd step of its iterations. The vectors $\mathbf{x} = \mathbf{q}^{(2k)}$ and $\mathbf{y} = \mathbf{p}^{(2k+1)}$ will

be the solutions of two sequentially-solved optimization problems. Let the arbitrary vector $\mathbf{p}^{(0)} \in \mathcal{P}$ on the step $k = 0$.

Problem $2k$:		Problem $2k+1$:	
maximize	$\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{p}^{(2k)}$	maximize	$\mathbf{q}^{T(2k+1)}\mathbf{y}$
subject to	$\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{x} = 1,$	subject to	$\mathbf{y}^\mathsf{T}\mathbf{y} = 1,$
	$J_n\mathbf{x} \geqslant 0.$		$AJ_m\mathbf{y} \geqslant 0.$

For each step of the algorithm the constants $\mathbf{p}^{(2k)}$ and $\mathbf{q}^{(2k+1)}$ equal the corresponding solutions $\mathbf{x}$ and $\mathbf{y}$ of the previous step. Since the maximizing functions and the constrains of both problems are convex, then the solution will be found in the finite number of steps. We recommend to use in the practice the following convex optimization methods [11, 12].

Obtain the solution of the optimization problem, vectors $\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}$ and execute the α-concordance procedure

$$\mathbf{q}_\alpha = (1-\alpha)\hat{\mathbf{p}} + \alpha\hat{\mathbf{q}},$$

if there exists a nontrivial solution $\mathbf{q}_\alpha$, that is $\hat{\mathbf{p}}^\mathsf{T}\hat{\mathbf{q}} \neq -1$. The vector $\mathbf{q}_\alpha$ and the vector $\mathbf{w}_\alpha = A^+\mathbf{q}_\alpha$ satisfy the condition (6). These vectors define the cones $\mathcal{W}$ and $\mathcal{Q}$ in the corresponding spaces and the intersection $\mathcal{W}_p = A\mathcal{W} \cap \mathcal{Q}$ is not empty. As for α-concordance procedure, when $\alpha \to 0$ we prefer expert estimations of objects. When $\alpha \to 1$ we prefer expert estimations of features.

The next section shows a way to obtain linear-scaled indicators using rank-scaled expert estimations.

The cones intersect: disturb the design matrix to get robust indicators

Consider the obtained intersection cone $\mathcal{Q}_p$ and the design matrix A. Disturb elements of the matrix $A = A + \Delta$. The normal distribution hypothesis is $\Delta = \delta I,\ \delta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$. The image of the linear map $\mathbf{q} = (A + \Delta)\mathbf{w}$ will have also the normal distribution. According to this hypothesis, take the indicator $\mathbf{q}_p$ as robust to a small disturbance of the matrix A when it has the maximal distance to the all faces of the cone $\mathcal{Q}_p$ subject to $\|\mathbf{q}_p\| = 1$. We call the Chebyshev point the vector $\mathbf{q}_p$ in the center of the inscribed sphere of the cone $\mathcal{Q}_p$.

To obtain the maximal distance from the desired vector $\mathbf{q}_p$ to a nearest face $\mathbf{s}$ of the cone solve the optimization problem

$$\hat{\mathbf{q}}_p = \arg\max_{\mathbf{q}_p \in \mathcal{Q}_p} \big\{ \|\mathbf{q}_p - \mathbf{s}\|^2, \text{where } \mathbf{s} \in \mathbb{R}^m \setminus \mathcal{Q}_p \text{ and } \|\mathbf{q}_p\| \leqslant 1 \big\}.$$

Take in account the system of linear inequalities (9), which define the cone $\mathcal{Q}_p$. Denote by $\mathbf{s}_\ell$ the normal vector corresponding to the line number ℓ of this system. The dot product $\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{s}_\ell = 0$ defines a plane passing through the origin of coordinates in the space of indicators. The distance d from the vector $\mathbf{q}_p$ to this plane equals

$$d(\mathbf{q}_p, \mathbf{s}_\ell) = \frac{\mathbf{q}_p^\mathsf{T}\mathbf{s}_\ell}{\|\mathbf{s}_\ell\|}.$$

This is the convex optimization problem

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & \inf\limits_{\ell=1,\ldots,L} \left(\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{s}_\ell \|\mathbf{s}_\ell\|^{-1}\right) \\ \text{subject to} & \mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{x} = 1, \\ & J_n\mathbf{x} \geqslant \mathbf{0}, \\ & AJ_m\mathbf{x} \geqslant \mathbf{0}. \end{array}$$

See geometry of the convex optimization methods in [11, 13]. The solution of the problem is the robust vector $\hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{q}}_p$. Also calculate the vector of the weights as $\mathbf{w}_p = A^+\hat{\mathbf{q}}_p$. These two vectors makes the concordant pair (6).

Thus, the linear-scaled indicator $\hat{\mathbf{q}}_p$ is obtained using the rank-scaled expert estimations.

References

[1] *Saari D. G.* Mathematics and voting // Notices of the American Mathematical Society. — 2008. — Vol. 55, No. 4. — Pp. 448–455.

[2] *Schiefer J., Fischer C.* The gap between wine expert ratings and consumer preferences: measures, determinants and marketing implications // International journal of wine business research. — 2008. — Vol. 20, No. 4. — Pp. 335–351.

[3] *Strijov V., Granic G., Juric Z., Jelavic B., S. A. M.* Integral indicator of ecological footprint for croatian power plants // HED Energy Forum "Quo Vadis Energija in Times of Climate Change Zagreb, Croatia. — 2009.

[4] *Strijov V., Shakin V.* Index construction: the expert-statistical method // Environmental research, engineering and management. — 2003. — Vol. 26, No. 4. — Pp. 51–55.

[5] *Draper N. R., Smith H.* Appied regression analysis. — John Wihley and Sons, 1998.

[6] *Belsley D. A.* Conditioning diagnostics: collinearity and weak data in regression. — New York: John Wiley and Sons, 1991.

[7] *Jolliffe I. T.* Principal component analysis. — Springer, 2002.

[8] *Isenmann A. J.* Modern multivariate statistical techniques. — Springer, 2008.

[9] *Golub G., Van Loan C.* Matrix computations. — Johns Hopkins Studies in Mathematical Sciences, 1996.

[10] *Hogben L.* Handbook of linear algebra. — CRC Press, 2007.

[11] *Boyd S., Vandenberghe L.* Convex optimization. — Cambridge University Press, 2009.

[12] *Minoux M.* Mathematical programming: theory and algorithms. — Wiley, 1986.

[13] *Dattorro J.* Convex optimization & Euclidean Distance Geometry. — Meboo Publishing, 2005.

Методы оптимальной группировки параметров долевого типа*

Бауман Е. В., Дорофеюк А. А., Москаленко Н. Е.
bau@ipu.ru
Москва, Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН
Москва, Всероссийская академия внешней торговли Минэкономразвития РФ

Введено понятие параметра долевого типа. Для таких параметров предложена процедура построения меры зависимости, а также разработан алгоритм их структуризации (экстремальной группировки).

Optimal fractional type parameter grouping methods*

Bauman E. V., Dorofeyuk A. A., Moskalenko N. E.
Institute of Control Sciences named by V. A. Trapeznikov RAS, Moscow, Russia
The Russian Academy for Foreign Trade, Moscow, Russia

The paper discusses the structural identification problem of complex control objects. To solve this problem it is proposed to use ranging data analysis methodology, including complex dependencies piecewise approximation algorithms.

Параметры долевого типа

В работе вводится понятие параметра долевого типа. Рассматривается множество из n *агрегированных объектов*, каждый из которых состоит из ряда *индивидуальных объектов*, которые описываются параметром $x \in \{x_1, \ldots, x_k\}$, измеренным в номинальной шкале. Тогда долевой параметр X — это набор положительных чисел, в сумме дающих единицу, отражающих доли градаций номинального признака — характеристики t-го агрегированного объекта. То есть значения X для t-го объекта — это вектор $A_t = (\alpha_t^{(1)}, \ldots, \alpha_t^{(k)})$, $t = 1, \ldots, n$, где $\alpha_t^{(i)}$ — доля индивидуальных объектов из t-го агрегированного объекта, для которых $x = x_i$. Для таких параметров должны выполняться следующие очевидные по построению ограничения:

$$\sum_{i=1}^{k} \alpha_t^{(i)} = 1, \quad t = 1, \ldots, n, \; i = 1, \ldots, k. \qquad (1)$$

Множество значений параметра долевого типа X для всех агрегированных объектов можно представить в виде $n \times k$ матрицы $A = \|\alpha_t^{(i)}\|$, $t = 1, \ldots, n$, $i = 1, \ldots, k$. Из (1) следует, что все её элементы положительны и суммы элементов по каждой строке равны 1. И наоборот, матрицу, удовлетворяющую перечисленным выше условиям, можно интерпретировать, как параметр долевого типа. Такие параметры также иногда называют линейными распределениями. Если исходный параметр — ранговый, то соответствующий параметр долевого типа будем называть ранговым параметром долевого типа.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты № 08-07-00347, № 10-07-00210.

Мера связи параметров долевого типа

Рассмотрим множество из n агрегированных объектов, каждый из которых состоит из ряда индивидуальных объектов. Будем считать, что индивидуальные объекты описываются двумя параметрами x и y, каждый из которых измерен в некоторой номинальной шкале. Пусть параметр принимает одно из k значений $x_1, \ldots, x_k$, а y — одно из m значений $y_1, \ldots, y_m$.

Рассмотрим соответствующие параметры долевого типа X и Y, описывающие агрегированные объекты. Значения этих параметров для t-го объекта представляют собой вектора $A_t = (\alpha_t^{(1)}, \ldots, \alpha_t^{(k)})$ и $B_t = (\beta_t^{(1)}, \ldots, \beta_t^{(m)})$ соответственно. Здесь $\alpha_t^{(i)}$ — доля индивидуальных объектов, принадлежащих t-му агрегированному объекту, для которых $x = x_i$, а $\beta_t^{(j)}$ — доля индивидуальных объектов, принадлежащих t-му агрегированному объекту, для которых $y = y_j$. Как и ранее, для $\alpha_t^{(i)}$ и $\beta_t^{(j)}$ выполняются условия нормировки типа (1).

Для содержательного обоснования предлагаемой меры связи предположим, что известны все данные по индивидуальным объектам. Тогда, кроме введённых выше параметров, рассмотрим параметр долевого типа G, называемый далее пересечением параметров X и Y,

$$G_t = (g_t^{(i,j)}), \; i = 1, \ldots, k, \; j = 1, \ldots, m, \qquad (2)$$

где $g_t^{(i,j)}$ — доля индивидуальных объектов, принадлежащих t-му агрегированному объекту, для которых $x = x_i$, а $y = y_j$. Если рассматривать введённые параметры в рамках вероятностной модели, то долю $\alpha_t^{(i)}$ можно интерпретировать как вероятность события «значение параметра равно x_i для t-го агрегированного объекта», а $\beta_t^{(j)}$ — как вероятность события «значение параметра y равно y_j

для t-го агрегированного объекта». Тогда $g_t^{(i,j)}$ можно интерпретировать как совместную вероятность наступления этих двух событий одновременно. В соответствии с теорией вероятностей введём матрицы условных вероятностей Q_t и R_t. Легко показать, что их элементы определяются соотношениями:

$$Q_t^{(i,j)} = \frac{g_t^{(i,j)}}{\alpha_t^{(i)}}, \quad R_t^{(i,j)} = \frac{g_t^{(i,j)}}{\beta_t^{(j)}}, \qquad (3)$$
$$i = 1, \ldots, k,\ j = 1, \ldots, m.$$

Из (3) непосредственно следует, что:

$$\beta_t^{(j)} = \sum_{i=1}^{k} Q_t^{(i,j)} \alpha_t^{(i)}, \quad \alpha_t^{(i)} = \sum_{j=1}^{m} R_t^{(i,j)} \beta_t^{(j)}, \qquad (4)$$
$$i = 1, \ldots, k,\ j = 1, \ldots, m,\ t = 1, \ldots, n.$$

Если матрицы (3) известны, то они отражают вероятностную зависимость номинальных параметров и y, а также соответствующих векторов A_t и B_t.

Теперь предположим, что индивидуальные данные недоступны (именно так и бывает в большинстве прикладных задач), а известны только значения долевых параметров X и Y. В этом случае значения показателя (2) и элементы матриц (3) непосредственно подсчитать невозможно.

Оценка матриц Q_t и R_t по значениям параметров X и Y

Сделаем следующее допущение: матрицы условных вероятностей (3) одинаковы для всех агрегированных объектов, то есть $Q_t = Q$, $R_t = R$. При этом будем считать, что соотношения (4) выполняются не точно, а с некоторой случайной погрешностью, имеющей характер аддитивного шума, то есть:

$$\begin{aligned} \beta_t^{(j)} &= \sum_{i=1}^{k} Q^{(i,j)} \alpha_t^{(i)} + \varepsilon_t^{(j)}, \\ \alpha_t^{(i)} &= \sum_{j=1}^{m} R^{(i,j)} \beta_t^{(j)} + \zeta_t^{(j)}, \\ i = 1, \ldots, k,\ & j = 1, \ldots, m,\ t = 1, \ldots, n. \end{aligned} \qquad (5)$$

где $\varepsilon_t^{(j)}$ и $\zeta_t^{(j)}$ — независимые нормально распределённые случайные величины с нулевым математическим ожиданием и дисперсией, одинаковой для всех объектов.

Регрессионные уравнения (5) дают возможность оценивать соответствующие матрицы с помощью метода наименьших квадратов. Другими словами, необходимо решить следующую задачу.

Требуется найти оценочные матрицы $\widehat{Q}$ и $\widehat{R}$, которые минимизируют выражения

$$\begin{aligned} F_1(\widehat{Q}) &= \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} \Bigg(\sum_{j=1}^{m} \Big(\beta_t^{(j)} - \sum_{i=1}^{k} \widehat{Q}^{(i,j)} \alpha_t^{(i)} \Big)^2 \Bigg), \\ F_2(\widehat{R}) &= \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} \Bigg(\sum_{i=1}^{k} \Big(\alpha_t^{(i)} - \sum_{j=1}^{m} \widehat{R}^{(i,j)} \beta_t^{(j)} \Big)^2 \Bigg), \end{aligned} \qquad (6)$$

при выполнении очевидных условий

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^{m} \widehat{Q}^{(i,j)} = 1, \quad \widehat{Q}^{(i,j)} \geqslant 0, \\ &\sum_{i=1}^{k} \widehat{R}^{(i,j)} = 1, \quad \widehat{R}^{(i,j)} \geqslant 0, \\ &i = 1, \ldots, k,\ j = 1, \ldots, m. \end{aligned} \qquad (7)$$

Формально, это — задача оценивания параметров регрессионной модели, где функции $F_1(\widehat{Q})$ и $F_2(\widehat{R})$ равны сумме квадратов отклонений от соответствующих моделей. В методе наименьших квадратов принято измерять качество модели коэффициентом детерминации. Для сформулированной задачи в качестве коэффициента детерминации естественно использовать величины

$$\begin{aligned} D_1(\widehat{Q}) &= \frac{T(Y) - F_1(\widehat{Q})}{T(Y)}, \\ D_2(\widehat{R}) &= \frac{T(X) - F_2(\widehat{R})}{T(X)}, \end{aligned} \qquad (8)$$

где $T(Y)$ и $T(X)$ — суммы квадратов отклонений векторов B и A соответственно от своих средних значений:

$$\begin{aligned} T(Y) &= \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} \Bigg(\sum_{j=1}^{m} \Big(\beta_t^{(j)} - \bar{\beta}^{(j)} \Big)^2 \Bigg), \\ T(X) &= \frac{1}{n} \sum_{t=1}^{n} \Bigg(\sum_{i=1}^{k} \Big(\alpha_t^{(i)} - \bar{\alpha}^{(i)} \Big)^2 \Bigg). \end{aligned} \qquad (9)$$

Преимущество коэффициента детерминации по сравнению с некоторыми другими мерами качества модели состоит в том, что он достаточно нагляден и легко интерпретируем — меняется от 0 до 1, и чем он ближе к 1, тем лучше модель. Сформулированные оптимизационные задачи решаются с помощью стандартных процедур квадратичного программирования.

Мера связи параметров долевого типа в задаче структуризации

Алгоритм структуризации (экстремальной группировки) параметров долевого типа должен использовать такую меру связи, которая будет учитывать не только степень зависимости парамет-

Таблица 1. Значения параметра X.

X	α_1	α_2	α_3	α_4
A_1	0,1	0,3	0,2	0,4
A_2	0,3	0,4	0,2	0,1
A_3	0,0	0,2	0,4	0,4
A_4	0,5	0,3	0,1	0,1
A_5	0,2	0,1	0,4	0,3
A_6	0,4	0,4	0,0	0,2
A_7	0,3	0,1	0,2	0,4
A_8	0,0	0,3	0,4	0,3
A_9	1,0	0,0	0,0	0,0
A_{10}	0,4	0,2	0,3	0,1
A_{11}	0,2	0,1	0,1	0,6
A_{12}	0,7	0,1	0,0	0,2
A_{13}	0,1	0,1	0,4	0,4
A_{14}	0,3	0,5	0,1	0,1
A_{15}	0,8	0,1	0,0	0,3
A_{16}	0,9	0,0	0,0	0,3
A_{17}	0,1	0,6	0,2	0,3
A_{18}	0,2	0,1	0,6	0,1
A_{19}	0,4	0,2	0,0	0,4
A_{20}	0,1	0,6	0,1	0,2

ров, определяемую по матрицам условных вероятностей Q_t и R_t, но и отклонение от предположения о постоянстве этих матриц, которое отражается в значениях критериев $F_1(\widehat{Q})$, $F_2(\widehat{R})$, $D_1(\widehat{Q})$, $D_2(\widehat{R})$. В алгоритмах экстремальной группировки параметров [1] в качестве меры связи используется определённое сочетание перечисленных критериев. Заметим, что критерии $F_1(\widehat{Q})$, $F_2(\widehat{R})$, $D_1(\widehat{Q})$, $D_2(\widehat{R})$ — несимметричны, что позволяет оценить, в определённом смысле, «направление» зависимости таких параметров.

Компьютерное моделирование

Для проверки работоспособности предложенной методики было проведено компьютерное моделирование, как на модельных, так и на реальных данных.

Компьютерное моделирование на модельных данных. Исследовались 20 агрегированных объектов. На них был построен параметр долевого типа X, состоящий из четырёх градаций. Значения параметра X приведены в таблице 1.

Значения параметра долевого типа Y, состоящего из трёх градаций, рассчитывались по следующей схеме. Задана матрица условных вероятностей Q, приведенная в таблице 2 (в таблице $P_{ij} = P(\beta_i/\alpha_j)$). По параметру X и матрице Q строились величины:

$$\tilde{\beta}_t^{(j)} = \max\left\{0, \sum_{i=1}^{4} Q^{(i,j)}\alpha_t^{(i)} + \delta z_t^{(j)}\right\},$$

Таблица 2.

Q	β_1	β_2	β_3
α_1	$P_{11} = 0,1$	$P_{21} = 0,8$	$P_{31} = 0,1$
α_2	$P_{12} = 0,3$	$P_{22} = 0,6$	$P_{32} = 0,1$
α_3	$P_{13} = 0,5$	$P_{23} = 0,4$	$P_{33} = 0,1$
α_4	$P_{14} = 0,4$	$P_{24} = 0,2$	$P_{34} = 0,4$

Таблица 3.

δ	$F_1(\widehat{Q})$	$D_1(\widehat{Q})$	$\rho(Q,\widehat{Q})$
0,0	0,000	1,000	0,000
0,1	0,010	0,731	0,011
0,2	0,038	0,465	0,042
0,3	0,077	0,393	0,105

где δ — константа, задающая уровень шума; $z_t^{(j)}$ — величины, полученные датчиком случайных чисел, распределённые равномерно на отрезке $[-1;+1]$; $j = 1,2,3$; $t = 1,\ldots,20$. Наконец, значения компонент (градаций) параметра Y вычислялись по формуле

$$\beta_t^{(j)} = \frac{\tilde{\beta}_t^{(j)}}{\sum\limits_{l=1}^{4} \tilde{\beta}_t^{(l)}}.$$

Такая схема введения шума в зависимость параметра Y от параметра X гарантирует выполнение соответствующих ограничений. В эксперименте строилась оценка $\widehat{Q}$ для матрицы условных вероятностей Q для четырёх разных уровней шума. Величина δ равнялась последовательно $0; 0,1; 0,2; 0,3$. Результаты эксперимента приведены в таблице 3.

В таблице 3 величина $\rho(\widehat{Q},Q) = (\widehat{Q}-Q)^2$, отражает насколько модельная матрица $\widehat{Q}$, полученная при разных уровнях шума, отличается от исходной матрицы Q. Если шума нет, то исходная матрица восстанавливается точно. При возрастании уровня шума возрастает значение $F_1(\widehat{Q})$ и падает значение коэффициента детерминации $D_1(\widehat{Q})$. Следует отметить хорошую корреляцию между вторым и четвертым столбцами таблицы 3, то есть между $F_1(\widehat{Q})$ и $\rho(\widehat{Q},Q)$. Следовательно, величина $F_1(\widehat{Q})$ достаточно хорошо отражает качество оценивания матрицы Q.

Компьютерное моделирование на реальных данных. Были взяты данные переписи населения России 2002 г. [2]. Анализировались некоторые демографические показатели 77 регионов России. В качестве первого параметра долевого типа X рассматривалась степень урбанизации региона ($\alpha_t^{(1)}$ — доля городских жителей в t-м регионе, а $\alpha_t^{(2)}$ — доля сельских). В качестве второго долевого параметра Y рассматривалась возрастная структура населения соответствующего региона ($\beta_t^{(1)}$ — доля людей в t-м регионе, чей возраст мень-

Таблица 4. Значения элементов матрицы $\widehat{Q}$, минимизирующие критерий $F_1(\widehat{Q})$.

Q	$P(\beta_1)$	$P(\beta_2)$	$P(\beta_3)$
α_1	$P_{11} = 0{,}156$	$P_{21} = 0{,}638$	$P_{31} = 0{,}206$
α_2	$P_{12} = 0{,}271$	$P_{22} = 0{,}542$	$P_{32} = 0{,}187$

Таблица 5. Значения элементов выборочной матрицы $P(Y/X)$.

$Q = P(Y/X)$	$P(\beta_1)$	$P(\beta_2)$	$P(\beta_3)$
α_1	$P_{11} = 0{,}165$	$P_{21} = 0{,}631$	$P_{31} = 0{,}204$
α_2	$P_{12} = 0{,}221$	$P_{22} = 0{,}560$	$P_{32} = 0{,}218$

ше трудоспособного; $\beta_t^{(2)}$ — доля людей трудоспособного возраста; $\beta_t^{(3)}$ — доля людей старше трудоспособного возраста). При рассмотрении демографических данных доля населения в регионе от суммарной численности населения во всех рассматриваемых регионах является тем масштабирующим коэффициентом d_t, который используется в критерии $F_3(\widehat{Q})$.

В таблице 4 приведены значения элементов матрицы $\widehat{Q}$, минимизирующие критерий $F_1(\widehat{Q})$. Для этой матрицы $F_1(\widehat{Q}) = 0{,}0025$ и $D_1(\widehat{Q}) = 0{,}245$. Расчёты показывают, что коэффициент детерминации получился значимым.

Из данных переписи можно извлечь также данные о пересечении рассматриваемых параметров. Отметим, что в построении матрицы $\widehat{Q}$ эти данные не использовались, поэтому их можно рассматривать как тестовый материал для модели. По этим данным была построена выборочная матрица условных вероятностей параметра Y от параметра X. Значения её элементов приведены в таблице 5.

Сравнение таблиц 4 и 5 показывает, что матрица оценок $\widehat{Q}$ достаточно хорошо соответствует реальной матрице Q (в данном случае $P(Q, \widehat{Q}) = 0{,}0039$).

Выводы

При проведении статистических, демографических, социологических и других подобных исследований статистические данные об исследуемых агрегированных объектах (город, регион, некоторая группа населения и т. п.) адекватно отражаются параметрами долевого типа (линейными распределениями). Одна из основных целей методов анализа данных — выявлении структуры зависимости между параметрами, описывающими исследуемые объекты. В случае, когда имеются данные не только об агрегированных, но и об индивидуальных объектах, зависимость между параметрами долевого типа можно оценить по зависимости между соответствующими номинальными параметрами. Социологические исследования проводятся на разных выборках индивидуальных объектов. Непосредственное сравнение двух номинальных параметров, значения которых получены на разных выборках, невозможно. Именно это обуславливает необходимость разработки специальной методики сравнения параметров долевого типа. В работе была разработана процедура сравнения параметров долевого типа, основанная на восстановлении условных матриц связи параметров индивидуальных объектов. Работоспособность процедуры подтверждена результатами компьютерного моделирования.

Литература

[1] *Браверман Э. М., Мучник И. Б.* Структурные методы обработки эмпирических данных. — М.: Наука, 1983.

[2] Итоги переписи населения 2002 г. Том 2: Возрастно-половой состав и состояние в браке. — М.: Статистика России, 2004.

Методы размытой упорядоченной классификации в задаче оценки альтернатив*

Бауман Е. В., Гольдовская М. Д., Кулькова Г. В.
bau@ipu.ru
Москва, Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН

Классическая задача оценивания множества альтернатив в некоторой ранговой шкале рассматривается как одна из задач классификационного анализа данных, а именно как задача построения упорядоченной автоматической классификации, при этом исследуется случай размытой постановки классификационного анализа.

Fuzzy ordered classification methods in alternative estimation problem*

Bauman E. V., Goldovskaya M. D., Kulkova G. V.
Institute of Control Sciences named by V.A. Trapeznikov RAS, Moscow, Russia

The classical problem of alternatives set estimation in a rank scale considered as one of data ranging analysis problems, precisely as an ordered clustering problem. The case of fuzzy ranging analysis problem formulation is investigated.

Методы классификационного анализа широко используются для решения разнообразных задач распознавания образов, автоматической классификации, экстремальной группировки параметров, анализа графов и др. [1, 2]. Наиболее интересные как в теоретическом, так и в прикладном аспекте результаты были получены в рамках постановки задачи размытой автоматической классификации [3].

Разработка методов решения задачи обработки экспертных оценок, особенно в ранговых и номинальных признаках [4], явилась стимулом для исследований по методам упорядоченной автоматической классификации, в том числе — размытой упорядоченной автоматической классификации.

В работе задача оценивания множества альтернатив в некоторой ранговой шкале рассматривается как задача построения упорядоченной классификации. Рассматривается два специальных класса размытых упорядоченных классификаций — унимодальная и k — интервальная размытая упорядоченная классификация.

Доказана важная теорема о том, что для произвольного частичного порядка размерности m всегда существует эквивалентная размытая упорядоченная классификация с числом уровней $m+1$.

Методы размытой упорядоченной классификации в задаче оценки альтернатив в ранговых шкалах

Задачу оценивания множества альтернатив $A = \{a, b, c, x, y, \dots\}$ в некоторой ранговой шкале $V = \{v_1, \dots, v_r\}$, $v_1 > v_2 > \dots > v_r$ можно рассматривать как задачу построения упорядоченной классификации этого множества, то есть разбиении множества A на уровни $A_1, \dots, A_r$, где

$$A_i = \{x \in A\colon v(x) = v_i\},$$
$$A_i \subseteq A; \quad A_i \cap A_j = \varnothing,\ i \neq j; \quad \bigcup_i A_i = A.$$

Считается, что альтернатива x лучше альтернативы y, если $v(x) > v(y)$. Как известно, введенное таким образом бинарное отношение «лучше» представляет собой слабый порядок (асимметричное, обратно транзитивное бинарное отношение).

Далее рассматривается размытая упорядоченная классификация, то есть предполагается, что её уровни $A_1, \dots, A_r$ размыты. Обозначим функцию принадлежности альтернативы x уровню A_i через $\mu(i, x)$; $i = 1, \dots, r$. Предполагается, что $0 \leqslant \mu(i, x) \leqslant 1$, $\sum\limits_i \mu(i, x) = 1$. Следовательно, функции принадлежности $\mu(i, x)$ данной альтернативы x можно рассматривать, как распределение её оценок на шкале V.

Таким образом, размытую упорядоченную классификацию можно задавать через вектор-функции принадлежности. Далее размытая упорядоченная классификация и соответствующий вектор-функция обозначаются через $M(*)$.

Задача сравнения двух альтернатив по размытой упорядоченной классификации сложнее, чем в неразмытом случае. Интуитивно можно предположить, что альтернатива x лучше альтернативы y, если распределение оценок x в определённом смысле лежит выше по шкале V, чем распределение оценок y. Введём следующее определение бинарного отношения «лучше» для размытой упорядоченной классификации.

Определение 1. *Для размытой упорядоченной классификации бинарное отношение $P_{M(*)}$ будем называть отношением «лучше», если:*

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты № 08-07-00347, 08-07-00349.

1. $xP_{M(*)}y \Leftrightarrow \forall k\colon 1 \leqslant k \leqslant r,\ \sum\limits_{i=1}^{k} \mu(i,x) \geqslant \sum\limits_{i=1}^{k} \mu(i,y)$;
2. $\exists k^*\colon \sum\limits_{i=1}^{k^*} \mu(i,x) > \sum\limits_{i=1}^{k^*} \mu(i,y)$.

Очевидно, что такое бинарное отношение является транзитивным и асимметричным, то есть является отношением частичного порядка (частичным порядком).

Одной из характеристик частичного порядка P является его размерность.

Определение 2. *Размерностью частичного порядка P называется число m минимально возможных слабых порядков $R_1, \ldots, R_m$, которые в пересечении дают данный частичный порядок P, то есть $P = \bigcap_j R_j$.*

Теорема 1.

1. *Пусть $M(*)$ — размытая упорядоченная классификация с r уровнями, тогда размерность частичного порядка $P_{M(*)}$, порождённого размытой упорядоченной классификацией $M(*)$ не будет превышать $r-1$.*
2. *Пусть m — размерность произвольного частичного порядка P, тогда всегда существует размытая упорядоченная классификация с $m+1$ уровнем, размерность которой равна P, то есть $P_{M(*)} = P$.*

Далее рассматривается два специальных класса размытых упорядоченных классификаций.

Определение 3. *Размытая упорядоченная классификация $M(*)$ называется унимодальной, если для любой альтернативы x функция $\varphi(x) = \mu(i,x)$ является унимодальной.*

Теорема 2. *Пусть m — размерность произвольного частичного порядка P, тогда существует такая унимодальная размытая упорядоченная классификация с $m+1$ уровнем, размерность которой равна P, то есть $P_{M(*)} = P$.*

Введём обозначение: под I_n^k будем понимать интервал чисел $\{n, (n+1), \ldots, \min\{(n+k), r\}\}$.

Определение 4. *Размытая упорядоченная классификация $M(*)$ называется k-интервальной, если для любой альтернативы x существует интервал $I_n^k(x)$ такой, что функция $\varphi(x) = \mu(i,x)$ равна нулю для любого номера $i \notin I_n^k(x)$.*

Теорема 3. *Для произвольной k-интервальной размытой упорядоченной классификации $M(*)$ её размерность $P_{M(*)}$ не превышает $k-1$.*

Разработаны алгоритмы размытой упорядоченной классификации, базирующиеся на общем алгоритме классификационного анализа [1] и учитывающие специфику упорядоченности (ранжировки) самих классов.

Выводы

В работе задача оценивания множества альтернатив в некоторой ранговой шкале рассматривается как одна из задач классификационного анализа данных, а именно как задача построения упорядоченной классификации, при этом исследуется случай размытой постановки классификационного анализа. Рассматривается два специальных класса размытых упорядоченных классификаций — унимодальная и k-интервальной размытая упорядоченная классификация.

Доказана важная теорема о том, что для произвольного частичного порядка размерности m всегда существует эквивалентная размытая упорядоченная классификация с числом уровней $m+1$.

Были разработаны алгоритмы размытой упорядоченной классификации, базирующиеся на общем алгоритме классификационного анализа данных [1]. Эти алгоритмы использовались при решении ряда прикладных задач анализа и совершенствования социально-экономических и организационных систем управления, в том числе при обработке экспертных оценок [2].

Литература

[1] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Классификационный анализ данных // «Избранные труды Международной конференции по проблемам управления. Том 1», Москва: СИНТЕГ, 1999.

[2] *Дорофеюк А. А., Дорофеюк Ю. А., Чернявский А. Л.* Экспертно-классификационые методы поддержки принятия решений в задачах анализа и оценки эффективности крупномасштабных социально-экономических систем управления // Управление развитием крупномасштабных систем (MLSD'2009): Труды Третьей международной конференции, М.: ИПУ РАН — 2009. — С. 28–37.

[3] *Бауман Е. В.* Методы размытой классификации (вариационный подход) // Автоматика и телемеханика. — 1988. — № 12.— С. 143–156.

[4] *Бауман Е. В.* Структуризация номинальных признаков в задачах экспертизы // В кн.: «Экспертные оценки в задачах управления». -М.: ИПУ. — 1982. — С. 16–23.

Построение и исследование распознающих процедур на основе полных решающих деревьев*

Генрихов И. Е., Дюкова Е. В.
ingvar1485@rambler.ru, edjukova@mail.ru
Москва, Вычислительный центр им. А. А. Дородницина РАН

Рассмотрены вопросы построения алгоритмов распознания при условии неполной информации, то есть в признаковых описаниях объектов встречаются пропуски. Построены модели использующие идею полных решающих деревьев. Приведены результаты тестирования на реальных задачах.

Рассматривается задача распознавания с вещественнозначными признаками $x_1, \ldots, x_n$, с непересекающимися классами $K_1, \ldots, K_l$ и множеством обучающих объектов $T = \{S_1, \ldots, S_m\}$, где $S_r = (a_{r1}, \ldots, a_{rn})$, $r \in \{1, \ldots, m\}$, и либо $a_{rj} \in \mathbb{R}$, либо $a_{rj} =$«*», $j = 1, \ldots, n$. В случае $a_{rj} =$«*» считается, что значение признака x_j для объекта S_r не определено. Пусть далее S — распознаваемый объект, $(b_1, \ldots, b_n)$ — описание объекта S, и либо $b_i =$«*», либо $b_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, n$.

Деревья решений являются одним из известных инструментов используемый в задаче распознавания. Процедура построения классического дерева решений представляет собой итерационный процесс. На каждом шаге выбирается признак, удовлетворяющий некоторому критерию ветвления, и строится вершина дерева. Однако, если при построении дерева несколько признаков удовлетворяют критерию ветвления в равной или почти равной мере, то выбор одного из них происходит случайным образом. В работе [4] предложена идея использования полных решающих деревьях (ПРД). В ПРД строятся так называемые полные вершины. Полной вершине соответствует набор признаков и ветвление происходит по каждому из признаков, входящих в этот набор. Каждой висячей вершине в ПРД соответствует пара (B, K), где B — элементарная конъюнкция над переменными $x_1, \ldots, x_n$, $K \in \{K_1, \ldots, K_l\}$. Описание объекта S может попасть в интервалы истинности конъюнкций, описывающих разные висячии вершины дерева. В случае, если таким висячим вершинам приписаны разные классы, то объект S зачисляется в тот класс, который порождается большинством из указанных висячих вершин (фактически осуществляется процедура голосования). В [4] данный подход продемонстрирован на примере усовершенствования алгоритма допустимых разбиений. В [1, 2] идея использования ПРД продемонстрирована на примере усовершенствования алгоритма C4.5.

В работах [1, 2, 4] были реализованы алгоритмы, предназначенные для обработки бинарной и целочисленной информации без наличия пропусков в признаковых описаниях объектов. В данной работе на базе алгоритма из [1] построены три алгоритма: AGI.Voice, AGI.La.max и AGI.La.sum. Новые алгоритмы предназначенные для обработки вещественнозначной информации с наличием пропусков в признаковых описаниях объектов. Отличие данных алгоритмов друг от друга состоит в том, что в них по разному осуществляется процедура голосования. Пусть v — висячая вершина, ей приписывается пара $\left(B_v, \{\omega_v^1, \ldots, \omega_v^l\}\right)$, B_v — элементарная конъюнкция над переменными $x_1, \ldots, x_n$, ω_v^i — оценка принадлежности объекта S классу K_i, вносимая вершиной v. Оценка ω_v^i вычисляется следующим образом. Пусть m_v^i — число объектов класса K_i, описание которых попадает в интервал истинности конъюнкции B_v, $m_v^* = \max\limits_{i=1,\ldots,l} m_v^i$ и пусть $m_v = \sum\limits_{i=1}^{l} m_v^i$. Тогда:

- в модели AGI.Voice $\omega_v^i = 1$, если $m_v^i = m_v^*$, $i = 1, \ldots, l$, и $\omega_v^i = 0$ в противном случае.
- в модели AGI.La.max $\omega_v^i = \frac{m_v^i + 1}{m_v + l}$, если $m_v^i = m_v^*$, $i = 1, \ldots, l$, и $\omega_v^i = 0$ в противном случае.
- в модели AGI.La.sum $\omega_v^i = \frac{m_v^i + 1}{m_v + l}$, $i = 1, \ldots, l$.

Пусть $N(S)$ — множество всех висячих вершин ПРД, такое что висячая вершина v принадлежит $N(S)$, если описание объекта S попадает в интервал истинности конъюнкции B_v. Положим $\Gamma(S, K_i) = \sum\limits_{v \in N(S)} \omega_v^i$, $i = 1, \ldots, l$. Объект S зачисляется в тот класс, для которого $\Gamma(S, K_i) = \max\limits_{j=1,\ldots,l} \Gamma(S, K_j)$, $i = 1, \ldots, l$. Если же таких классов несколько, то среди них выбирается только один, а именно тот, который имеет наибольшее число объектов в обучающей выборке, иначе происходит отказ алгоритма от классификации.

ПРД в алгоритмах AGI.La.max, AGI.La.sum и AGI.Voice построены с использованием энтропийного критерия информативности, модифицированного с учетом наличия неполной и вещественнозначной информации в описаниях объектов. Проведено сравнение этих алгоритмов с алгоритмами из системы интеллектуального анализа данных, распознавания и прогнозирования [6], а именно с алгоритмом голосования по тупиковым тестам, генетическим методом, нейронной се-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-01-00770, гранта Президента РФ по поддержке ведущих научных школ НШ № 7950.2010.1

тью, а также с алгоритмом C5.0 [9] (улучшенная, коммерческая версия C4.5). Тестирование алгоритмов проводилось на прикладных задачах медицинской диагностики. Алгоритм AGI.La.sum показал лучшие результаты по сравнению с AGI.Voice и AGI.La.max на большинстве рассмотренных задач, а также неплохие результаты при сравнении с остальными алгоритмами.

Критерий выбора оптимального порога признака в алгоритмах AGI.La.max, AGI.La.sum и AGI.Voice

Выбор оптимального порога признака для ветвления осуществляется на основе энтропийного критерия информативности. Рассмотрим данный критерий.

Обозначим через $f(K_i, T),\ i \in \{1, \ldots, l\}$ число объектов из множества T, относящихся к классу K_i, и R_t — множество объектов из T для которых значение признака x_t не определено. Вероятность P_t^i того, что случайно выбранный объект из множества T по признаку x_t будет принадлежать классу K_i, равна

$$\frac{f(K_i, T \setminus R_t)}{|T \setminus R_t|}.$$

Величина, вычисляемая по формуле

$$\mathrm{Info}(T)_t = -\sum_{i=1}^{l} P_t^i \log_2 P_t^i$$

называется количеством информации (энтропией) по признаку x_t, необходимое для определения класса, которому принадлежит объект из множества T.

Пусть $\{c_1, \ldots, c_u\},\ u \leqslant m$ — множество различных значений по признаку $x_t,\ c_{i+1} > c_i$, $1 \leqslant i \leqslant u-1$. Пусть объекты $S_{i_1} = (a_{i_1 1}, \ldots, a_{i_1 n})$, $S_{i_2} = (a_{i_2 1}, \ldots, a_{i_2 n})$ из T принадлежат разным классам. Если $a_{i_1 t} = c_i$ и $a_{i_2 t} = c_{i+1}$, тогда число $k_{t_i} = (c_i + c_{i+1})/2,\ 1 \leqslant i \leqslant u-1$, является порогом признака x_t.

Обозначим через $G_t = \{k_{t_1}, \ldots, k_{t_j}\}$ — множество порогов признака x_t. Порог $k \in G_t$ разбивает множество T на два подмножества $\{T_k^{(1)}, T_k^{(2)}\}$. $T_k^{(1)}$ $\left(T_k^{(2)}\right)$ состоит из объектов множества T, для которых $a_{rt} \leqslant k$ $(a_{rt} > k),\ r = 1, \ldots, m$.

Величина, вычисляемая по формуле

$$\mathrm{Info}(x_t)_k = \frac{|T_k^{(1)}|}{|T \setminus R_t|}\mathrm{Info}(T_k^{(1)}) + \frac{|T_k^{(2)}|}{|T \setminus R_t|}\mathrm{Info}(T_k^{(2)})$$

называется количеством информации, необходимым для определения класса, которому принадлежит объект из множества T после разбиения T по порогу k признака x_t.

Информационный выигрыш (information gain) после выбора порога k признака x_t вычисляется по формуле $\mathrm{Gain}(x_t)_k = \mathrm{Info}(T)_t - \mathrm{Info}(x_t)_k$.

Величина, вычисляемая по формуле

$$\mathrm{SplitInfo}(x_t)_k = -\frac{|T_k^{(1)}|}{|T \setminus R_t|}\log_2\frac{|T_k^{(1)}|}{|T \setminus R_t|} - \frac{|T_k^{(2)}|}{|T \setminus R_t|}\log_2\frac{|T_k^{(2)}|}{|T \setminus R_t|}$$

определяет потенциальную информацию, получаемую при разбиении множества T по порогу k признака x_t.

Оптимальным порогом в G_t для признака x_t будем считать порог k для которого величина

$$\mathrm{GainRatio}(x_t)_k = \frac{\mathrm{Gain}(x_t)_k}{\mathrm{SplitInfo}(x_t)_k},$$

принимает свое наибольшее значение.

Описание алгоритмов AGI.La.max, AGI.La.sum и AGI.Voice

В алгоритмах AGI.La.max, AGI.La.sum и AGI.Voice, при построении ПРД, на каждом шаге строится полная вершина, которой соответствует набор равноценных признаков. Пусть полной вершине μ соответствует набор признаков $\{x_{j_1}, \ldots, x_{j_q}\},\ 1 \leqslant q \leqslant n$. Тогда из вершины μ исходит q дуг $t_1, \ldots, t_q$. Дуга $t_r,\ r = 1, \ldots, q$, связывает вершину μ с обычной вершиной x_{j_r}.

Алгоритмы AGI.La.max, AGI.La.sum, AGI.Voice являются рекурсивными. Пусть $T(a_{rj})$ — матрица задаваемая обучающей выборкой T. Обозначим через $\tilde{T}$ матрицу, рассматриваемую на текущем шаге алгоритма, $\tilde{X} = \{x_j \in X_T \mid b_j \neq \text{«*»}\}$, где X_T — множество всех признаков на текущем шаге рекурсии. На первом шаге $\tilde{T} = T(a_{rj}),\ X_T = \{x_1, \ldots, x_n\}$. Шаг рекурсии в алгоритме AGI.Voice представляет собой последовательность действий 1–3, описанных ниже.

1. Из матрицы $\tilde{T}$ вычеркиваются все столбцы с номерами j, для которых $a_{1j} = \cdots = a_{mj}$. Если $\tilde{T} \neq \varnothing$, то переходим к следующему шагу, иначе рекурсия останавливается.
2. Если $\tilde{X} = \varnothing$, то переходим к третьему шагу рекурсии, иначе для каждого признака $x_j \in \tilde{X}$ вычисляется значение $\mathrm{GainRatio}(x_j)_k$, при этом если $G_j = \varnothing$, то $\mathrm{GainRatio}(x_j)_k = 0$. Если есть хотя бы один признак $x_j \in \tilde{X}$, для которого $\mathrm{GainRatio}(x_j)_k \neq 0$, то вызывается процедура выбора признаков, иначе переходим к третьему шагу рекурсии. Пусть в результате выбран набор признаков $X = \{x_{j_1}, \ldots, x_{j_q}\}$, $1 \leqslant q \leqslant n$. Создается полная вершина с меткой $\{x_{j_1}, \ldots, x_{j_q}\}$, и ветвление происходит по каждому признаку $x_{j_t} \in X$. Для каждого признака x_{j_t} по оптимальному порогу k, создаются две дуги исходящих из вершины x_{j_t}. Если остается один столбец в матрице $\tilde{T}$, то при построении подматриц $\tilde{T}_k^{(1)}$ и $\tilde{T}_k^{(2)}$ этот столбец не

удаляется. Для левой (правой) дуги строится подматрица $\tilde{T}_k^{(1)}$ ($\tilde{T}_k^{(2)}$) матрицы $\tilde{T}$, полученная удалением столбца, соответствующего признаку x_{j_t}, и строк S_r, в которых $a_{rj_t} > k$ ($a_{rj_t} \leqslant k$), $r = 1, \ldots, m$. Если получившаяся подматрица $\tilde{T}_k^{(1)}$ ($\tilde{T}_k^{(2)}$) содержит объекты одного класса, то переходим к третьему шагу, иначе полагается $\tilde{T} = \tilde{T}_k^{(1)}$ ($\tilde{T} = \tilde{T}_k^{(2)}$). Если $\tilde{T}$ состоит из одного столбца, то переходим к третьему шагу, иначе осуществляется рекурсивный переход к первому шагу рекурсии.

3. Пусть $\tilde{T}$ содержит m_v^i объектов класса K_i, $i = 1, \ldots, l$. Строится висячая вершина v с меткой $\left(B_v, \{\omega_v^1, \ldots, \omega_v^l\}\right)$, B_v — конъюнкция соответствующая данной вершине, $\omega_v^i = 1$, если $m_v^i = \max\limits_{j=1,\ldots,l} m_v^j$, $i = 1, \ldots, l$ и $\omega_v^i = 0$ в противном случае.

Замечание: так как при построении ПРД происходит лавинообразный рост числа вершин и ветвей, то увеличивается и время классификации объекта. Для того, чтобы сократить это время, предлагается строить только те ветви, которые дают голос за принадлежность распознаваемого объекта S классу $K \in \{K_1, \ldots, K_l\}$ (при использовании данного предложения время счета сокращалось более, чем в 2 раза).

Процедура выбора набора признаков X для ветвления представляет собой следующую последовательность шагов:

1. Пусть $\tilde{T}$ содержит w столбцов, соответствующих признакам $x_{j_1}, \ldots, x_{j_w}$. Тогда $Y = \{x_{j_1}, \ldots, x_{j_w}\}$.
2. Вычисляется средний информационный выигрыш
$$q = \frac{1}{w} \sum_{i=j_1,\ldots,j_w} \mathrm{GainRatio}(x_i)_k.$$
3. Определяется число признаков, для которых информационный выигрыш выше среднего или равен ему $n = \sum\limits_{i=j_1,\ldots,j_w} c_i$, где
$$c_i = \begin{cases} 1, & \text{если } \mathrm{GainRatio}(x_i)_k \geqslant q; \\ 0, & \text{если } \mathrm{GainRatio}(x_i)_k < q. \end{cases}$$
Признаки x_i, для которых $\mathrm{GainRatio}(x_i)_k < q$, $i = j_1, \ldots, j_w$, удаляются из Y.
4. Вычисляется $h = \min\limits_{x_i \in Y} \mathrm{GainRatio}(x_i)_k$.
5. Если $(q/n) + h \geqslant \max\limits_{x_i \in Y} \mathrm{GainRatio}(x_i)_k$, то происходит выход из процедуры и возвращается Y, иначе осуществляется переход к третьему шагу процедуры, положив $q := (q/n) + h$.

Схема работы AGI.La.max аналогична схеме AGI.Voice, только на шаге 3 используется понятие Лапласовского корректора [7]. На 3 шаге алгоритма AGI.La.max производится следующее действие:

— Пусть $\tilde{T}$ содержит m_v^i объектов класса K_i, $i = 1, \ldots, l$, $m_v = \sum\limits_{i=1}^{l} m_v^i$. Строится висячая вершина v с меткой $\left(B_v, \{\omega_v^1, \ldots, \omega_v^l\}\right)$, B_v — конъюнкция соответствующая данной вершине, $\omega_v^i = \frac{m_v^i + 1}{m_v + l}$, если $m_v^i = \max\limits_{j=1,\ldots,l} m_v^j$, $i = 1, \ldots, l$ и $\omega_v^i = 0$ в противном случае.

Схема работы AGI.La.sum аналогична схеме AGI.La.max, только шаг 3 несколько отличается. На шаге 3 алгоритма AGI.La.sum производится следующее действие:

— Пусть $\tilde{T}$ содержит m_v^i объектов класса K_i, $i = 1, \ldots, l$, $m_v = \sum\limits_{i=1}^{l} m_v^i$. Строится висячая вершина v с меткой $\left(B_v, \{\omega_v^1, \ldots, \omega_v^l\}\right)$, B_v — конъюнкция соответствующая данной вершине, $\omega_v^i = \frac{m_v^i + 1}{m_v + l}$, $i = 1, \ldots, l$.

Результаты численного эксперимента

Тестирование построенных в работе алгоритмов осуществлялось на 12 прикладных задачах медицинской диагностики. Качество алгоритмов оценивалось методом скользящего контроля с удалением одного объекта обучения («leave-one-out»). Вычислялись величины $Q = \frac{1}{l} \sum\limits_{i=1}^{l} q_i$ и $\tilde{Q} = \frac{m^+}{m}$, где q_i — процент правильно классифицируемых объектов класса K_i, l — число классов, m^+ — число правильно классифицированных объектов, m — число объект в обучающей выборке. Для сравнения использовались следующие алгоритмы: голосования по тупиковым тестам, генетический метод, нейронная сеть [6]. Данные алгоритмы входят в систему интеллектуального анализа данных, распознавания и прогнозирования (версия 2.0, ООО «Центр технологий анализа и прогнозирования “Решения”»). Так же для сравнения использовался известный алгоритм C5.0 [9], данный алгоритм запускался без применения методов «бустинга» и отсечения.

В таблице 1 представлены результаты работы алгоритмов. Для каждой задачи и каждого алгоритма приведены значения величин Q (строка сверху) и $\tilde{Q}$ (строка снизу).

Лучшими алгоритмами по показателю Q по всем задачам стали: алгоритм голосования по тупиковым тестам, AGI.La.sum, AGI.Voice и AGI.La.max. Каждый из этих алгоритмов показал максимальное значение величины Q среди всех алгоритмов на 4 задачах. Лучшими алгоритмами по показателю $\tilde{Q}$ по всем задачам стали AGI.La.sum, AGI.Voice и AGI.La.max. Алгоритм AGI.Voice показал максимальное значение величины $\tilde{Q}$ среди всех алгоритмов на 5 задачах, алгоритмы AGI.La.sum и AGI.La.max на 4 задачах.

Таблица 1. Эффективность алгоритмов.

№ задачи (m, n, l)	C5.0	AGI. Voice	AGI. La. sum	AGI. La. max	Генетический метод	Нейронная сеть	Голос. по тупик. тестам
Задача 1	50,0	53,13	54,17	53,13	56,25	59,4	**60**,**42**
(60, 69, 2)	**80**,**0**	65,0	66,67	65,0	75,0	70,0	66,67
Задача 2	46,53	48,28	**50**,**01**	48,86	49,71	49,15	49,75
(196, 17, 2)	**85**,**71**	78,57	81,63	79,59	87,76	80,10	67,86
Задача 3	65,03	72,50	72,09	72,09	– – –	**75**,**56**	71,28
(155, 19, 2)	79,36	**83**,**87**	83,23	83,23	– – –	83,23	81,94
Задача 4	82,17	**82**,**72**	80,94	**82**,**72**	78,39	77,75	66,78
(145, 35, 2)	86,21	**88**,**28**	86,90	**88**,**28**	86,90	83,45	80,0
Задача 5	64,32	**83**,**76**	**83**,**76**	**83**,**76**	77,18	82,33	62,26
(73, 35, 2)	64,38	**83**,**56**	**83**,**56**	**83**,**56**	76,71	82,19	61,64
Задача 6	60,29	60,98	59,80	61,96	51,67	61,37	**69**,**31**
(132, 24, 2)	75,0	74,24	74,24	75,76	**78**,**03**	71,21	**78**,**03**
Задача 7	72,65	63,08	64,19	63,08	71,03	**79**,**40**	76,67
(114, 5, 3)	73,68	58,77	60,53	58,77	67,54	**79**,**83**	74,56
Задача 8	85,75	**89**,**68**	**89**,**68**	**89**,**68**	85,28	83,01	84,54
(77, 7, 2)	87,01	**89**,**61**	**89**,**61**	**89**,**61**	85,71	84,42	87,01
Задача 9	70,0	68,75	**71**,**25**	70,0	53,75	62,50	70,0
(80, 18, 2)	70,0	68,75	**71**,**25**	70,0	53,75	62,50	70,0
Задача 10	70,87	75,83	77,02	75,27	– – –	77,15	**77**,**45**
(131, 9, 2)	80,92	81,68	82,44	80,92	– – –	80,92	**84**,**73**
Задача 11	76,33	79,42	79,92	79,75	81,50	81,17	**82**,**75**
(270, 13, 2)	76,67	80,37	80,74	80,74	81,85	81,11	**83**,**70**
Задача 12	74,13	**82**,**23**	81,24	**82**,**23**	75,70	81,24	70,86
(61, 18, 2)	77,05	**83**,**61**	**83**,**61**	**83**,**61**	80,33	83,61	75,41

Стоит отметить, что величина $\tilde{Q}$ не является корректной величиной по сравнению с величиной Q, когда один из классов в обучающей выборке, состоит из небольшого числа объектов по сравнению с остальными классами. Величина Q, в отличие от величины $\tilde{Q}$, учитывает распределение объектов по классам, и поэтому чаще всего $Q \leqslant \tilde{Q}$. Например, алгоритм C5.0 в задаче 1 не распознал ни одного объекта класса 2, хотя распознал все объекты класса 1 и поэтому $Q = 50{,}0$, а $\tilde{Q} = 80{,}0$. Алгоритм AGI.La.sum распознал 4 объекта класса 2 и совершил 12 ошибок на классе 1, поэтому $Q = 54{,}17$, а $\tilde{Q} = 66{,}67$.

Исследование и построение распознающих процедур на основе ПРД показало возможность использования данного подхода, когда в признаковых описаниях объектов присутствуют вещественнозначная инофрмация и пропуски. Лучшим из построенных алгоритмов стал — AGI.La.sum, который показала неплохие результаты на многих задачах по сравнению с другими алгоритмами.

Литература

[1] *Генрихов И. Е.* Построение полного решающего дерева на базе алгоритма C4.5 // Сообщение по прикладной математике. Москва: ВЦ РАН — 2009.— 24 с.

[2] *Генрихов И. Е., Дюкова Е. В.* Усовершенствование алгоритма C4.5 на основе использования полных решающих деревьев // Математические методы распознавания образов // Доклады 14-й Всероссийской конференции. Москва: МАКС Пресс. — 2009. — С. 104–107.

[3] *Донской В. И., Башта А. И.* Дискретные модели принятия решений при неполной информации. — Симферополь: Таврия, 1992. — С. 33–74.

[4] *Дюкова Е. В., Песков Н. В.* Об алгоритме классификации на основе полного решающего дерева // Математические методы распознавания образов // Доклады 13-й Всероссийской конференции. Москва: МАКС Пресс. — 2007. — С. 125–126.

[5] *Дюкова Е. В., Журавлев Ю. И., Песков Н. В.* Обработка вещественнозначной информации логическими процедурами распознавания // Искусственный интеллект. №2 — 2004.— С. 80–85.

[6] *Журавлев Ю. И., Рязанов В. В., Сенько О. В.* Распознавание Математические методы Программная система Практические применения. — Москва: ФАЗИС. — 2006.

[7] *Kuncheva L. I.* Combining Pattern Classifiers Methods and Algorithms. Published by John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. — 2004. — Pp. 154–163.

[8] *Kohavi R., Quinlan J. R.* Decision tree discovery. Handbook of Data Mining and Knowledge Discovery. — 1999. — `http://robotics.stanford.edu/~ronnyk/treesHB.pdf`

[9] *Quinlan J. R.* See5/C5.0 DEMO. RULEQUEST RESEARCH. — 2008. — `http://www.rulequest.com/see5-info.html`

[10] *Quinlan J. R.* C4.5: Programs for Machine Learning. Morgan Kaufmann. San Mateo. CA. — 1993.

Распознавание и визуализация множества элементов, представленных взаимными близостями*

Двоенко С. Д., Панферов А. В.
dsd@tsu.tula.ru, av-panferov@yandex.ru
Тула, Тульский государственный университет

Для случая, когда элементы множества представлены своими взаимными близостями, рассмотрено представление данных в координатном пространстве визуализации. Приведены результаты эксперимента по распознаванию известных психологических тестов Холзингера и их визуализации.

Recognition and visualization of a set of members by mutual similarities*

Dvoenko S. D., Panferov A. V.
Tula State University, Tula, Russia

In a case of a set members are presented by mutual similarities, a visualization coordinate space is inder investigation. Experimental results are shown for recognition and visualization of Holzinger's psychological tests.

Введение

В современных условиях стало обычным явлением, что данные могут быть сразу же представлены в виде матрицы парных сравнений элементов анализируемого множества. Результатом сравнения в количественных шкалах может быть неотрицательная величина различия или сходства элементов множества.

Если матрица сходства положительно полуопределена, то ее можно рассматривать как матрицу скалярных произведений в некотором неизвестном нам метрическом (например, евклидовом) пространстве, размерность которого не превышает числа элементов множества. Такая матрица сходства может быть преобразована в матрицу различий (расстояний) и наоборот. Если элементами множества являются признаки, то в качестве матрицы их сходства достаточно взять матрицу модулей или квадратов взвешенных скалярных произведений (корреляций) признаков.

Возможность визуального представления данных всегда оказывается весьма полезной. Для многомерного признакового пространства приходится решать задачу отображения в пространство значительно меньшей размерности (одно-, двух- или трехмерное). Такую редукцию размерности не удается выполнить без потерь, что требует оценки ее качества, например в виде доли объясняемой дисперсии в методе главных компонент.

В случае, когда пространство, в которое погружены элементы множества, неизвестно, проблема редукции не возникает. В итоге, мы оказываемся свободны в выборе подходящего способа отображения, где пространство визуализации оказывается не более, чем трехмерным. Тем не менее, проблема потерь при редукции размерности пространства никуда не исчезает, если данные попарных сравнений отражают действительно многомерные зависимости. Эта проблема лишь становится недоступной нам для решения.

В данной работе рассмотрен метод построения трехмерного координатного пространства визуализации, связанный с решением задачи распознавания. Решение заключается в построении направляющего вектора разделяющей гиперплоскости. В отсутствие исходного пространства строится «направляющий» объект (элемент), представленный своими близостями с элементами множества, который и рассматриваеся как одна из координатных осей визуализации. Очевидно, что адекватность такого визуального отображения обоснована лишь решением задачи распознавания.

Для решения задачи распознавания используется известный алгоритм Б. Н. Козинца [1], переформулированный для взаимных расстояний и близостей между элементами множества [2]. Рассмотрена задача распознавания и визуализации психологических тестов К. Холзингера [3], для которой получен новый результат (решение задачи би-факторного анализа психологических тестов как задачи распознавания).

Распознавание элементов множества на основе их взаимных близостей

Пусть относительно начала координат ω_0 вычислена матрица $C(N,N)$ взаимных скалярных произведений $c_{ij} = (\omega_i \circ \omega_j)$ элементов $\omega_i, \omega_j \in \Omega$ обучающего множества Ω, где N — их число.

Для элементов $\omega_i, \omega_j \in \Omega$, представленных взаимными скалярными произведениями, решающее правило в неизвестном нам метрическом пространстве имеет вид [2]

$$(\omega_a \circ \omega) + a_0 = c_{a\omega} + a_0, \qquad (1)$$

где ω_a — «направляющий» элемент, a_0 — его «смещение» относительно начала координат ω_0, ω — но-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-07-00394.

вый элемент. Если (1) неотрицательно, то $\omega \in \Omega_1$, иначе $\omega \in \Omega_2$.

Пусть элементы $\omega_i \in \Omega$ обучающего множества $\Omega_1 \cup \Omega_2$ представлены своими нормализованными взаимными близостями $s(\omega_i, \omega_j) \geqslant 0,\ \omega_j \in \Omega$, где близость элемента с самим собой $s(\omega_i, \omega_i) = 1$.

Применим алгоритм Б. Н. Козинца, модифицированный для взаимных скалярных произведений элементов [2], чтобы построить правило (1) для распознавания новых элементов ω. В итоге, необходимо вычислить величину

$$(\omega_a \circ \omega) + a_0 = s(\omega^+, \omega) - s(\omega^-, \omega)$$

для распознавания нового элемента ω, где элементы $\omega^+ \in \Omega_1$ и $\omega^- \in \Omega_2$ найдены на этапе обучения алгоритмом Козинца и принадлежат выпуклым оболочкам разделяемых множеств Ω_1 и Ω_2.

Алгоритм Козинца обладает следующим свойством: между элементами $\omega^+ \in \Omega_1$ и $\omega^- \in \Omega_2$ не содержится ни одного элемента обучающей совокупности $\Omega_1 \cup \Omega_2$. Если $d(\omega^+, \omega^-)$ — длина интервала между элементами ω^+ и ω^-, то интервал длины $(1-\varepsilon)\, d(\omega^+, \omega^-)$, расположенный на «оси» направляющего элемента ω_a посередине между элементами ω^+ и ω^-, не содержит ни одного другого элемента. Здесь $0 < \varepsilon < 1$ — достаточно малая наперед заданная величина параметра точности алгоритма.

Такой интервал ограничен двумя «точками» на «оси» направляющего элемента ω_a:

$$a_0' = -\big(s(\omega^+, \omega^+) - s(\omega^+, \omega^-)\big) + \varepsilon d(\omega^+, \omega^-)/2;$$
$$a_0'' = -\big(s(\omega^+, \omega^-) - s(\omega^-, \omega^-)\big) - \varepsilon d(\omega^+, \omega^-)/2,$$

где первая точка представлена смещением a_0' от начала координат ω_0 в сторону класса Ω_1, а вторая точка представлена противоположным смещением a_0'' от начала координат ω_0 в сторону класса Ω_2.

Если $d(\omega^+, \omega^-) < \eta$, где $0 < \eta < 1$ — достаточно малая наперед заданная величина порога разделимости, то выпуклые оболочки разделяемых множеств пересекаются.

Представление в координатном пространстве

Очевидно, что пространство визуализации является не более, чем трехмерным координатным пространством. В качестве оси абсцисс удобно взять направляющий элемент ω_a, который представлен (1) относительно остальных элементов множества $\omega \in \Omega$. На такой оси ω_a начало координат ω_0 естественным образом оказывается совмещенным с разделяющей плоскостью, которая проходит перпендикулярно оси абсцисс.

Таким образом, ось ординат лежит в разделяющей плоскости, а ее направление должно представить разброс элементов на ней в наибольшей степени. Очевидно, что третья ось аппликат должна быть ортогональной двум предыдущим осям.

Пусть задана матрица $X(N, n)$ и вычислена матрица скалярных произведений $C(N, N)$ элементов относительно начала координат ω_0. Возьмем векторы обучающего множества $\mathbf{x}_k$, $k = 1, \ldots, N$ и построим их линейную комбинацию $\sum_{k=1}^N \beta_k \mathbf{x}_k$, где $\sum_{k=1}^N \beta_k^2 = 1$, которую рассмотрим как новый элемент $\omega_\beta = \omega\left(\sum_{k=1}^N \beta_k \mathbf{x}_k\right)$. Представим элемент ω_β своими скалярными произведениями с другими элементами $(\omega_\beta \circ \omega_i) = c_{\beta i}$, $i = 1, \ldots, N$, где

$$c_{\beta i} = \sum_{l=1}^n x_{il} \sum_{k=1}^N \beta_k x_{kl} = \sum_{k=1}^N \beta_k \sum_{l=1}^n x_{il} x_{kl} = \sum_{k=1}^N \beta_k c_{ik}\,.$$

Будем рассматривать элемент ω_β как ось ординат. Тогда он должен быть ортогонален элементу ω_a, т. е. $(\omega_\beta \circ \omega_a) = c_{\beta a} = 0$, где

$$c_{\beta a} = \sum_{l=1}^n a_l \sum_{k=1}^N \beta_k x_{kl} = \sum_{k=1}^N \beta_k \sum_{l=1}^n a_l x_{kl} = \sum_{k=1}^N \beta_k c_{ak}\,.$$

Найдем два самых удаленных друг от друга (с наименьшей величиной их скалярного произведения) элемента $\omega_p = \omega(\mathbf{x}_p)$ и $\omega_q = \omega(\mathbf{x}_q)$, не являющихся самыми удаленными на оси направляющего элемента ω_a. Найдем элемент $\omega_v = \omega(\mathbf{v}) = \omega(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q)$ и представим его скалярными произведениями с другими элементами $(\omega_v \circ \omega_i) = c_{vi}$, $i = 1, \ldots, N$, где

$$c_{vi} = \sum_{l=1}^n (x_{pl} - x_{ql}) x_{il} = c_{pi} - c_{qi}\,,$$

а также скалярным произведением $c_{v\beta} = (\omega_v \circ \omega_\beta)$ с элементом ω_β, где

$$c_{v\beta} = \sum_{l=1}^n (x_{pl} - x_{ql}) \sum_{k=1}^N \beta_k x_{kl} = \sum_{k=1}^N \beta_k (c_{pk} - c_{qk})\,.$$

Пусть элемент ω_β направлен так, что проекция на него элемента ω_v максимальна. Для построения оси ординат ω_β решается задача

$$\sum_{k=1}^N \beta_k (c_{pk} - c_{qk}) \to \max$$

при ограничениях $\sum_{k=1}^N \beta_k^2 = 1$, $\sum_{k=1}^N \beta_k c_{ak} = 0$.

Ее решение методом множителей Лагранжа:

$$\beta_k = B_k / \sqrt{\textstyle\sum_{s=1}^N B_s^2}\,,\quad k = 1, \ldots, N,$$
$$B_k = c_{pk} - c_{qk} - c_{ak}\Big(\textstyle\sum_{i=1}^N c_{ai}(c_{pi} - c_{qi})\Big) \Big/ \sum_{i=1}^N c_{ai}^2\,.$$

Наконец, построим ось аппликат. Возьмем векторы обучающего множества $\mathbf{x}_k$, $k = 1, \ldots, N$, и построим их линейную комбинацию $\sum_{k=1}^N \gamma_k \mathbf{x}_k$, где $\sum_{k=1}^N \gamma_k^2 = 1$, которую рассмотрим как новый элемент $\omega_\gamma = \omega\left(\sum_{k=1}^N \gamma_k \mathbf{x}_k\right)$. Представим элемент

ω_γ своими скалярными произведениями с другими элементами $(\omega_\gamma \circ \omega_i) = c_{\gamma i},\ i = 1, \ldots, N$, где

$$c_{\gamma i} = \sum_{l=1}^{n} x_{il} \sum_{k=1}^{N} \gamma_k x_{kl} = \sum_{k=1}^{N} \gamma_k \sum_{l=1}^{n} x_{il} x_{kl} = \sum_{k=1}^{N} \gamma_k c_{ik}\,.$$

Как ось аппликат элемент ω_γ ортогонален элементу ω_a, т. е. $(\omega_\gamma \circ \omega_a) = c_{\gamma a} = 0$, где

$$c_{\gamma a} = \sum_{l=1}^{n} a_l \sum_{k=1}^{N} \gamma_k x_{kl} = \sum_{k=1}^{N} \gamma_k \sum_{l=1}^{n} a_l x_{kl} = \sum_{k=1}^{N} \gamma_k c_{ak}\,,$$

а также ортогонален элементу ω_β, т. е. $(\omega_\gamma \circ \omega_\beta) = c_{\gamma\beta} = 0$, где

$$c_{\gamma\beta} = \sum_{l=1}^{n} \sum_{k=1}^{N} \gamma_k x_{kl} \sum_{t=1}^{N} \beta_t x_{tl} = \sum_{k=1}^{N} \gamma_k c_{\beta k}\,.$$

Найдем среди элементов $\omega_i,\ i = 1, \ldots, N$, элемент ω_s как наиболее «ортогональный» элементам ω_a и ω_β, для которого величина $|c_{as}| + |c_{\beta s}|$ минимальна.

Пусть элемент ω_γ направлен так, что проекция на него $c_{\gamma s} = (\omega_\gamma \circ \omega_s)$ элемента ω_s максимальна. Для построения оси аппликат ω_γ решается задача

$$\sum_{k=1}^{N} \gamma_k c_{sk} \to \max$$

при $\sum_{k=1}^{N} \gamma_k^2 = 1,\ \sum_{k=1}^{N} \gamma_k c_{ak} = 0,\ \sum_{k=1}^{N} \gamma_k c_{\beta k} = 0$.

Ее решение методом множителей Лагранжа:

$$\gamma_k = \tfrac{1}{B_3}\left(-B_1 c_{ak} + B_2 c_{sk} + c_{\beta k}\right),\ k = 1, \ldots, N,$$

$$B_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N} c_{\beta i}^2 \sum_{j=1}^{N} c_{sj} c_{aj} - \sum_{i=1}^{N} c_{ai} c_{\beta i} \sum_{j=1}^{N} c_{sj} c_{\beta j}}{\sum_{i=1}^{N} c_{ai} c_{\beta i} \sum_{j=1}^{N} c_{sj} c_{aj} - \sum_{i=1}^{N} c_{ai}^2 \sum_{j=1}^{N} c_{sj} c_{\beta j}},$$

$$B_2 = \frac{B_1 \sum_{i=1}^{N} c_{ai}^2 - \sum_{i=1}^{N} c_{ai} c_{\beta i}}{\sum_{i=1}^{N} c_{si} c_{ai}},$$

$$B_3 = \sqrt{\textstyle\sum_{i=1}^{N} \left(B_2 c_{si} - B_1 c_{ai} + c_{\beta i}\right)^2}\,.$$

Эксперимент и визуализация

Рассмотрим данные К. Холзингера [3] о корреляциях 24 психологических тестов, характеризующих интеллектуальное развитие учащихся. Тесты разбиты на 5 групп: четыре теста пространственного восприятия (1–4), пять вербальных тестов (5–9), четыре теста на скорость мышления (10–13), шесть тестов памяти (14–19) и пять тестов математических способностей (20–24).

Эти данные имеют интересную историю их обработки. Данные были собраны при опросе 145 учащихся в Чикаго (1934 г.) для демонстрации метода би-факторного анализа и считаются сложными, так как было отмечено, что тесты из группы математических способностей имеют тенденцию распределяться по другим группам [3]. Попытки их обработки другими методами (экстремальная группировка в 1970 г. [4] и кластер-анализ в 2009 г. [5]) также в целом оказались неудачными и подтвердили первоначальное предположение.

Таблица 1. Результаты скользящего контроля.

Группы	n_1	n_2	n_{11}	n_{12}	p_{11}	p_{12}
1	4	20	2	2	0,50	0,50
2	5	19	5	0	1,00	0,00
3	4	20	4	0	1,00	0,00
4	6	18	5	1	0,83	0,17
5	5	19	3	2	0,60	0,40
Всего	24	96	19	5	0,79	0,21

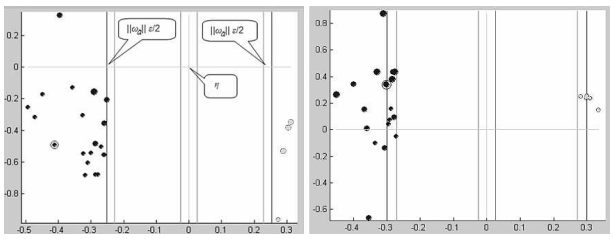
Нетрудно заметить, что задача би-факторного анализа психологических тестов является, по сути, задачей обучения распознаванию пяти классов на этом множестве. Но предыдущие попытки ее решения методами факторного анализа не опирались на идеологию распознавания образов. Поэтому вместо построения общих факторов, представляющих заранее заданные группы психологических тестов (т. е. признаков), в данной работе решается задача распознавания признаков. Построены линейные решающие правила, полностью отделяющие каждую группу тестов от всех остальных групп алгоритмом Козинца по модулям коэффициентов корреляций.

В итоге, все группы тестов распознаются безошибочно (рис. 1.1–1.5).

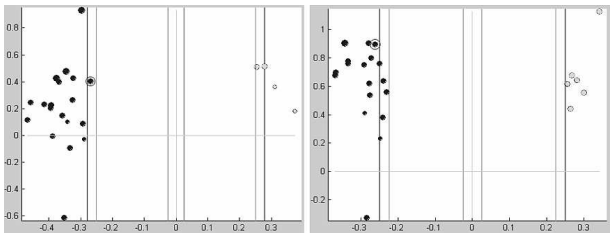
Качество решения задачи обучения было оценено методом скользящего контроля. Здесь ситуация оказалась сложнее.

Пусть n_1 — число тестов данной группы (класс 1, распознаваемый как «свой»), n_2 — число тестов из остальных групп (класс 2, распознаваемый как «чужой»), n_{11} — число правильно распознанных тестов данной группы, n_{22} — число правильно распознанных тестов из остальных групп, n_{12} — число неправильно распознанных тестов данной группы, n_{21} — число тестов из других групп, неправильно отнесенных к данной группе. Получим соответствующие оценки вероятностей: $p_{11} = n_{11}/(n_{11} + n_{12})$ для правильного распознавания своих тестов, $p_{12} = n_{12}/(n_{11} + n_{12})$ — что свой тест распознан как чужой, $p_{21} = n_{21}/(n_{21} + n_{22})$ — что чужой тест распознан как свой, $p_{22} = n_{22}/(n_{21} + n_{22})$ для правильного распознавания чужих тестов.

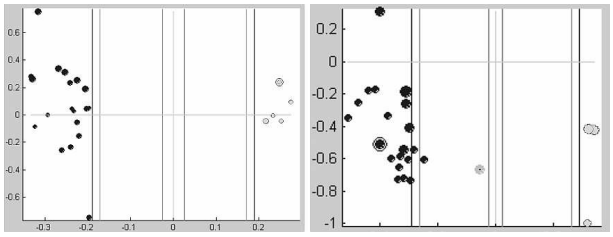
В табл. 1 показаны только значения p_{11} и p_{12}, т. к. для всех групп $p_{21} = 0$ и $p_{22} = 1$. Оказалось, что ошибки относятся только к случаю, когда свой тест распознается как чужой. Средняя доля правильного распознавания (79%) одиночной группы тестов против всех не очень высока, т. к. очень плохо распознаются тесты первой (50%) и пятой



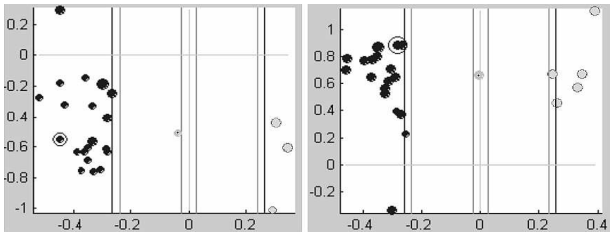
1. Пространство. 2. Вербальность.



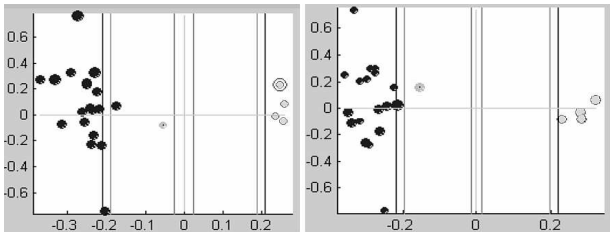
3. Скорость мышления. 4. Память.



5. Математика. 6. Тест 1 — Зрительное восприятие.



7. Тест 4 — Флажки. 8. Тест 19 — Фигура-слово.



9. Тест 21 — Головоломки. 10. Тест 24 — Задачи.

Рис. 1. 1–5: распознавание групп (светлые элементы справа); 6–10: ошибки скользящего контроля, устраненные смещением гиперплоскости влево по оси абсцисс (контрольные элементы помечены точкой в центре). Ось аппликат показана размером элементов.

групп (60%). Что касается пятой группы тестов математических способностей, то это было ожидаемо.

Легко увидеть, что каждая группа тестов в отдельности является малонаполненной по сравнению с остальными группами, объединенными вместе. Из-за этого «форма» отдельной группы тестов в гипотетическом пространстве оказывается «нестабильной», что определяет низкий результат качества распознавания при скользящем контроле.

Очевидно, что ошибка при скользящем контроле возникает, когда распознаваемый объект ω оказывается единственным в «промежутке» между выпуклыми оболочками разделяемых множеств, но с «неправильной» стороны от разделяющей гиперплоскости. Если такой объект все же можно отделить от чужого класса, то ошибку легко устранить, «сместив» гиперплоскость к множеству Ω_1 на величину $a_0' + \eta$ или к множеству Ω_2 на величину $a_0'' - \eta$.

При распознавании тестов все ошибки первой (тесты 1 и 4), четвертой (тест 19) и пятой (тесты 21 и 24) групп были устранены сдвигом гиперплоскости к множеству Ω_2 (большой чужой класс) на величину $a_0'' - \eta$ (рис. 1.6–1.10). Для этого оказалось достаточным обеспечить $\varepsilon = \eta = 0{,}02$.

Заключение

Рассмотрен метод построения трехмерного координатного пространства визуализации, связанный с решением задачи распознавания. Решение данной задачи заключается в построении направляющего вектора разделяющей гиперплоскости. В отсутствие исходного пространства строится «направляющий» элемент, представленный своими близостями с элементами анализируемого множества, который рассматриваеся как одна из координатных осей визуализации. Адекватность такого визуального отображения обоснована решением задачи распознавания.

Приведен результат распознавания групп психологических тестов Холзингера и их визуализации, доказывающий разделимость групп.

Литература

[1] *Козинец Б. Н.* Рекуррентный алгоритм разделения выпуклых оболочек двух множеств // Алгоритмы обучения распознаванию образов. — М.: Сов. радио, 1973. — С. 43–50.

[2] *Двоенко С. Д.* Распознавание элементов множества, представленных взаимными расстояниями и близостями // Всеросс. конф. ММРО-14, Суздаль, 2009. — С. 112–115.

[3] *Harman H. H.* Modern Factor Analysis. — Chicago: University Chicago Press, 1976.

[4] *Лумельский В. Я.* Группировка параметров на основе квадратной матрицы связей // Автоматика и телемеханика. — 1970. — № 1. — С. 133–143.

[5] *Двоенко С. Д.* Кластеризация множества, описанного парными расстояниями и близостями между его элементами // Сиб. журн. индустр. матем. — 2009. — Т. 12:1. — С. 61–73.

Методы структуризации многомерных динамических объектов*

Дорофеюк А. А., Бауман Е. В., Покровская И. В.
daa2@mail.ru
Москва, Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН

Предлагается общая постановка задачи структурного анализа многомерных динамических объектов (САМДО). Каждый объект характеризуется набором значений параметров для некоторой последовательности моментов времени (траекторией). В рамках вариационного подхода разработан алгоритм САМДО. Доказана его сходимость, обеспечивающая стационарность предельного значения критерия качества.

Multidimensional dynamic objects structuring methods*

Dorofeyuk A. A., Bauman E. V., Pokrovskaya I. V.
Institute of Control Sciences named by V. A. Trapeznikov RAS, Moscow, Russia

The general formulation multidimensional dynamic objects structure analysis problem is suggested (SAMDO). Each object is characterized by the set of parameters values for some suquense of time moments (trajectory). In the framework of variational approach the algorithm SAMDO is developed. The convergence of this algorithm, which ensures the quality criteria limit value stationarity, is proved.

При исследовании систем управления возникает проблема динамического анализа многопараметрической информации. Использование обычных методов анализа здесь проблематично. В рамках вариационного подхода к задачам классификационного анализа [1] предлагается общая постановка задачи структурного анализа многомерных динамических объектов (САМДО).

Постановка задачи

Постановка задачи САМДО формулируется с использованием трёх основных понятий: классифицируемое множество объектов, класс допустимых классификаций и функционал качества разбиения [1].

Классифицируемое множество объектов. В САМДО классифицируется конечное множество объектов, изменяющихся во времени. Пусть в каждый момент времени объекты описываются фиксированным набором параметров $x^{(1)}, \ldots, x^{(k)}$. Для каждого объекта снимается m значений каждого параметра в соответствующие моменты времени. Таким образом, каждый объект характеризуется серией из m векторов $x_1, \ldots, x_m$ в k-мерном пространстве параметров X, представляющих собой траекторию изменения данного объекта в пространстве X. Итак, необходимо классифицировать множество $X = \{\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_n\}$; $X \subseteq \mathbb{R}^{k+m}$.

Заметим, что моменты времени, в которые сняты значения параметров у разных объектов, могут быть разные.

Класс допустимых классификаций. Размытой классификацией множества $X = \{\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_n\}$ на r классов с фоновым классом называется $(r+1)$-мерная вектор-функция [1]

$$H(\tilde{x}) = \big(h_0(\tilde{x}), \ldots, h_r(\tilde{x})\big).$$

Здесь $h_0(\tilde{x})$ — функция принадлежности $\tilde{x}$ к фоновому классу, а $h_i(\tilde{x})$ — функция принадлежности $\tilde{x}$ к i-му классу, $i = 1, \ldots, r$. Для любого $\tilde{x}$ значение $H(\tilde{x})$ должно принадлежать некоторому ограниченному замкнутому множеству V пространства значений вектор-функции H, то есть $H(\tilde{x}) \in V \subseteq \mathbb{R}^{r+1}$. Множество V определяет тип размытости для данной задачи. Таким образом, рассматривается следующий класс размытых классификаций: $\Xi(V) = \big\{H\colon \forall \tilde{x} \in X \to H(\tilde{x}) \in V\big\}$.

Критерий качества классификации. В рамках общего вариационного подхода все исследования проводятся для произвольного выпуклого функционала от вектор-функции H. Критерий качества классификации строится в соответствии с методом обобщенного среднего [1].

Объекты одного и того же класса искомой классификации должны хорошо описываться некоторой моделью траекторий этого класса, а объекты, чьи траектории плохо описываются моделями всех классов, должны попасть в так называемый «фоновый» класс [1]. Поэтому критерий качества должен отражать, во-первых, близость траекторий объектов внутри нефоновых классов и, во-вторых, отнесение к фоновому классу объектов, чьи траектории достаточно удалены от моделей нефоновых классов. Далее, вводится в рассмотрение множество Λ возможных моделей траекторий классов. Между элементами множества объектов X и элементами множества моделей Λ вводится мера близости $K(\tilde{x}, \tilde{\alpha}), \quad \tilde{x} \in X, \quad \tilde{\alpha} \in \Lambda$. В таком случае величина $K(h(\tilde{x}), \tilde{\alpha}) = \sum_{j=1}^{n} K(\tilde{x}_j, \tilde{\alpha}) h(\tilde{x}_j)$ отражает меру того, насколько хорошо модель $\tilde{\alpha}$ описывает

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты №№ 08-07-00347, 08-07-00347, 10-07-00210.

точки множества, заданного через свою функцию принадлежности $h(\tilde{x})$. Обобщённым средним или эталоном множества, заданного функцией принадлежности $h(\tilde{x})$, называется модель

$$\tilde{\alpha}_h = \arg\max_{\tilde{\alpha}\in\Lambda} K(h(\tilde{x}), \tilde{\alpha}). \qquad (1)$$

В соответствии с этим вводится следующий критерий качества классификации

$$J(H) = \sum_{i=1}^{r} K(h_i(\tilde{x}), \tilde{\alpha}_{h_i}) + B\sum_{j=1}^{n} h_0(\tilde{x}_j), \qquad (2)$$

где $\tilde{\alpha}_{h_i}$ — эталон i-го класса (в дальнейшем вместо $\tilde{\alpha}_{h_i}$ будем писать $\tilde{\alpha}_i$), а B — некоторая константа, регулирующая отнесение объектов к фоновому классу. Задача классификации — максимизация функционала (2) по функциям принадлежностей объектов к классам. В каждом классе строится эталонная траектория, отражающая общую тенденцию динамики показателей для объектов данного класса.

Вид оптимальной классификации САМДО

Для выявления вида классификации, максимизирующей функционал (2), исследован вид его субдифференциала в данной точке (классификации) H. Справедлива следующая лемма.

Лемма 1. *Для классификации H^* вектор-функция $F(\tilde{x}) = \big(f_0(\tilde{x}), \ldots, f_r(\tilde{x})\big)$, у которой $f_0(\tilde{x}) = B$, $f_i(\tilde{x}) = K(\tilde{x}, \tilde{\alpha}_i^*)$, $i = 1, \ldots, r$, где $\tilde{\alpha}_i^*$ — обобщенное среднее i-го класса классификации H^*, является субградиентом функционала (2) в точке H^*.*

Центральным для вариационного подхода является понятие опорной классификации. Применительно к методу обобщённого среднего это понятие трансформируется в понятие эталонной классификации. Рассмотрим некоторый вектор моделей $A = (\tilde{\alpha}_1, \ldots, \tilde{\alpha}_r) \in \Lambda$. Назовем классификацию $H_A(\tilde{x}) = (h_0(\tilde{x}), \ldots, h_r(\tilde{x}))$ — эталонной с вектором A, если она является опорной к вектор-функции $F(\tilde{x}) = \big(f_0(\tilde{x}), \ldots, f_r(\tilde{x})\big)$, у которой $f_0(\tilde{x}) = B$, $f_i(\tilde{x} = K(\tilde{x}, \tilde{\alpha}_i)$, $i = 1, \ldots, r$, то есть

$$H_A(\tilde{x}) = \arg\max_{(h_0,\ldots,h_r\in V)} \Big(\sum_{i=1}^{r} K(\tilde{x}, \tilde{\alpha}_i)h_i + Bh_0\Big). \qquad (3)$$

На базе этой леммы доказана теорема о виде оптимальной классификации для САМДО.

Теорема 2. *Если классификация H^* доставляет максимум функционалу (2), то тот же максимум достигается на некоторой эталонной классификации $H_A(\tilde{x}) = (h_0(\tilde{x}), \ldots, h_r(\tilde{x}))$ с вектором эталонов $A = (\tilde{\alpha}_1, \ldots, \tilde{\alpha}_r) \in \Lambda$, компоненты которого $\tilde{\alpha}_i$ в свою очередь являются обобщенными средними классов эталонной классификации.*

Алгоритм ДСА

Алгоритм ДСА является частным случаем общего алгоритма классификационного анализа [2], который реализуется следующим образом.

Выбирается некоторая начальная классификация H_0. Затем применяется следующая итерационная процедура: для классификации H_n в каждом нефоновом классе находится его обобщенное среднее $\tilde{\alpha}_i^n$ (соотношение (1)), и по вектору $A^n = (\tilde{\alpha}_1^n, \ldots, \tilde{\alpha}_r^n)$ строится $(n+1)$-е приближение оптимальной классификации $H_n + 1 = H_{A^n}$, где H_{A^n} — эталонная классификация для вектора моделей $A^n = (\tilde{\alpha}_1^n, \ldots, \tilde{\alpha}_r^n)$ (соотношение (3)), и т.д. Сходимость этого алгоритма следует из сходимости общего алгоритма [1].

Способы реализации САМДО

Конкретизация общей задачи производится по двум направлениям: рассмотрение различных видов функционала (2) и различных типов размытости.

Модели траекторий классов — множество возможных траекторий объектов. Как и при классификации обычных объектов, наиболее простым вариантом введения множества моделей классов является множество всех возможных траекторий объектов, то есть $\Lambda_1 = \mathbb{R}^{m+k}$. Другими словами, модели (эталоны) классов представляют собой в пространстве параметров траектории такой же длины, как и объекты, то есть можно считать, что $\forall\tilde{\alpha} \in \Lambda$, $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_m)$, где в свою очередь $\alpha_i = \big(\alpha_i(1), \ldots, \alpha_i(k)\big)$ — вектор в пространстве параметров, отражающий состояние модели в i-й момент времени. Для множества эталонов Λ_1 рассматриваются следующие меры близости.

Мера близости типа l_2. Эта мера близости совпадает с евклидовым расстоянием в пространстве $\mathbb{R}^{m+k}$: $K_1(\tilde{x}, \tilde{\alpha}) = -\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k}\big(x_i^{(j)} - \alpha_i^{(j)}\big)^2$. Знак минус в этой формуле стоит из-за естественного предположения — «чем больше мера близости, тем ближе точки», а у расстояния должно быть наоборот. Использование данной меры приводит к тому, что траектории объектов классифицируются как точки евклидова пространства $\mathbb{R}^{m+k}$ с использованием критерия средневзвешенной дисперсии. В результате обобщённые средние классов будут совпадать с центрами классов в этом пространстве. Следовательно, в окончательной классификации классы будут характеризоваться средними траекториями классов.

Мера близости типа l_1. Эта мера близости совпадает с расстоянием, которое подсчитывается как сумма модулей в пространстве $\mathbb{R}^{m+k}$: $K_2(\tilde{x}, \tilde{\alpha}) = -\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k}\big|x_i^{(j)} - \alpha_i^{(j)}\big|$. Использование дан-

ной меры приводит к тому, что обобщённые средние классов будут совпадать с медианами классов в пространстве $\mathbb{R}^{m+k}$.

Мера близости с учётом приращения параметров. При анализе динамики часто нужно разбить объекты на группы схожих не по абсолютным значениям параметров, а по их приращениям. Для этого в меру близости добавляется расстояние между приращениями.

$$K_3(\tilde{x},\tilde{\alpha}) = -D_0 \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k}\left(x_i^{(j)} - \alpha_i^{(j)}\right)^2 - \\ - D_1 \sum_{i=2}^{m}\sum_{j=1}^{k}\left(\left(x_i^{(j)} - x_{i-1}^{(j)}\right) - \left(\alpha_i^{(j)} - \alpha_{i-1}^{(j)}\right)\right)^2,$$

где D_0 и D_1 — некоторые весовые коэффициенты.

Модельные траектории классов — представители классов. Другой возможностью ввода множества эталонов является использование самого исходного множества объектов, то есть $\Lambda_2 = X$, а в качестве меры близости — одной из мер $K_1(\tilde{x},\tilde{\alpha})$, $K_2(\tilde{x},\tilde{\alpha})$ или $K_3(\tilde{x},\tilde{\alpha})$. В данном случае эталонная траектория каждого из классов будет совпадать с траекторией одного из объектов.

Качественное описание модельных траекторий классов. Во многих случаях классы необходимо описывать не количественно, а качественно. Например, можно описать один из классов в следующих терминах: по первому параметру траектории объектов класса вначале имеют низкие значения, затем большие, а затем опять уменьшаются; а по второму параметру все время они имеют большие значения. Таких качественных описаний может быть много, приведем примеры некоторых из них.

Пусть по параметру $x^{(j)}$ весь диапазон значений разделен на p интервалов, а $u_t^{(j)}$ — среднее значение t-го интервала по j-му параметру. Обозначим множество средних значений интервалов параметра $x^{(j)}$ через $U^{(j)} = \{u_1^{(j)},\ldots,u_p^{(j)}\}$. Будем считать, что модели классов в каждый момент времени и по каждому параметру могут принимать лишь значения из $U^{(j)}$. Тогда вектора параметров моделей классов в каждый момент времени могут принимать значения только из множества $\Lambda_4^{(\cdot)} = U^{(1)}\times\ldots\times U^{(k)}$. В качестве множества моделей будем рассматривать множество $\Lambda_4 = \underbrace{\Lambda_4^{(\cdot)}\times\ldots\times\Lambda_4^{(\cdot)}}_{m}$. Рассматривая для этого множества моделей меры близости $K_1(\tilde{x},\tilde{\alpha})$ и $K_2(\tilde{x},\tilde{\alpha})$, получаем функционалы, в которых параметры моделей описываются в градациях.

Качественное описание эталонных траекторий классов с учётом приращений. Более сложный вариант качественного описания моделей траекторий классов даётся в терминах приращений. Пусть, например, класс описывается в следующих терминах: по первому параметру траектории объектов класса вначале возрастают, затем не меняются, а затем уменьшаются; а по второму параметру всё время убывают. В подобных случаях на q градаций разбивается диапазон значений приращения каждого параметра $x^{(j)}$, то есть разбивается диапазон значений параметра $y^{(j)}$, который в i-й момент времени принимает значение $y_t^{(j)} = x_t^{(j)} - x_{t-1}^{(j)}$. Обозначим множество средних значений интервалов параметра $y^{(j)}$ через $G^{(j)} = \{g_1^{(j)},\ldots,g_q^{(j)}\}$. Пусть $\Lambda_5^{(\cdot)} = G^{(1)}\times\ldots\times G^{(k)}$. В качестве множества моделей будем рассматривать множество $\Lambda_5 = \underbrace{\Lambda_4^{(\cdot)}\times\ldots\times\Lambda_4^{(\cdot)}}_{m}\times\underbrace{\Lambda_5^{(\cdot)}\times\ldots\times\Lambda_5^{(\cdot)}}_{m-1}$. Его элемент будет иметь в качестве компонент m значений вектора параметров α_i (они соответствуют векторам параметров x_i,) и $(m-1)$ значение вектора β_i (они соответствуют векторам приращений y_i, $2\leqslant i\leqslant m$). Для этого случая мера близости $K_3(\tilde{x},\tilde{\alpha})$ имеет вид

$$K_3(\tilde{x},\tilde{\alpha}) = -D_0 \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{k}\left(x_i^{(j)} - \alpha_i^{(j)}\right)^2 - \\ - D_1 \sum_{i=2}^{m}\sum_{j=1}^{k}\left(\left(x_i^{(j)} - x_{i-1}^{(j)}\right) - \beta_i^{(j)}\right)^2.$$

Исследуются также различные типы классификаций, получаемых при экстремизации функционала (2). Пусть в результате экстремизации функционала получена некоторая эталонная классификация $H_A(\tilde{x}) = (h_0(\tilde{x}),\ldots,h_r(\tilde{x}))$ с вектором моделей $A = (\tilde{\alpha}_1,\ldots,\tilde{\alpha}_r)\in\Lambda$. Построим вектор-функцию $F(\tilde{x}) = \big(f_0(\tilde{x}),\ldots,f_r(\tilde{x})\big)$, у которой $f_0(\tilde{x}) = B$, $f_i(\tilde{x}) = K(\tilde{x},\tilde{\alpha}_i)$. За счёт выбора ограничивающего множества V можно получить различные типы размытости с учётом фонового класса [1].

Схемы порождения данных в задачах САМДО

В постановке задачи САМДО фигурирует множество объектов $X = \{\tilde{x}_1,\ldots,\tilde{x}_n\}$ — множество траекторий (фиксированной длины) изменения набора параметров. К таким данным можно прийти различными способами.

Куб данных. Обычно исходный материал о функционировании исследуемой системы представляет собой куб данных «объект — параметр — время»: $\|y_{ti}^{(j)}\|$; $i = 1,\ldots,N$; $j = 1,\ldots,K$; $t = 1,\ldots,T$, N — число объектов; K — число параметров; T — число моментов времени.

Классификация множества объектов куба данных. В качестве примера рассмотрим задачу классификации предприятий некоторой отрасли или региона по результатам их работы за год,

причём данные о параметрах их функционирования снимаются ежемесячно (ежеквартально). Такая постановка точно укладывается в рассматриваемую схему САМДО. Здесь $n = N$, $k = K$, $m = T = 12$ ($m = T = 4$) и $\tilde{x}_l = \|y_{ti}^{(j)}\|$, $j = 1, \ldots, K$, $t = 1, \ldots, T$ — таблица значений «параметр — момент времени» для i-го объекта, $l = jt$. Таким образом, множество объектов куба данных в таком случае и является классифицируемым множеством.

Увеличение числа объектов за счёт разбиения периода времени куба данных. Если данные о работе предприятий снимаются не за один год, а за несколько, причём часто происходит изменение (обновление) самого предприятия, то целесообразно использовать более сложный вариант порождения данных. В этом случае при классификации лучше считать отдельным объектом пару «предприятие — год» и объектом будет траектория изменения вектора параметров предприятия за год, то есть $n = N \times T_1$; $k = K$; $m = 12$ ($m = 4$), где $T_1 = T/m$ — число лет, и таблица значений «параметр — момент времени» для i-го предприятия за τ-й год будет иметь вид (здесь $l = i \times (m-1) + \tau$, $p = m \times (\tau - 1) + t$): $\tilde{x}_l = \|y_{pi}^{(j)}\|$; $j = 1, \ldots, K$; $t = 1, \ldots, m$. В общем случае, весь период времени куба данных разбивается на участки одинаковой длины, и классифицируются траектории изменения данных по объектам на этих участках.

Увеличение числа объектов за счёт использования скользящего «окна» фиксированной длины. Если число моментов времени T в кубе данных достаточно велико, то можно предположить, что для каждого объекта (предприятия) его длинная траектория изменения вектора параметров во времени состоит из коротких участков траектории стандартного вида, например, соответствующих становлению, расцвету, реорганизации предприятия или сезонным колебаниям в его работе и т.д. Задача состоит в нахождении такого набора траекторий и описания функционирования предприятия в этих терминах. Для этого рассматривается таблица значений «параметр — момент времени» для i-го предприятия, фиксируется длина m коротких участков траекторий, которые затем анализируются. В качестве объектов рассматриваются все возможные траектории длины m, получаемые из общей траектории для данного предприятия. Отличие от предыдущего случая состоит в том, что весь период времени не разбивается на участки, а рассматривается «окошко» фиксированной длины, которое сдвигается вдоль траектории каждого объекта.

Классификация таких участков приводит к тому, что для каждого предприятия получается последовательность номеров классов, к которым оно принадлежит в разные моменты времени. Обобщённые средние классов в данном случае и дают набор стандартных участков траекторий, в терминах которых можно интерпретировать данную последовательность, т.е. качественно описать динамику функционирования предприятия в терминах выбранной системы параметров.

Классификация объектов куба данных без фиксированных моментов времени. Обычно в кубе данных объекты синхронизированы по времени. В задачах САМДО это не обязательно. Так, например, если исследуется влияние некоторого управленческого воздействия на определённую группу предприятий, то за период наблюдений несколько раз снимают характеристики их состояния. Задача состоит в выявлении наиболее типичных реакций на данное воздействие. В этом случае синхронизация моментов времени съёма данных идет не по абсолютному времени, а по номеру съёма данных (например, данные снимаются каждый квартал после начала воздействия).

Выводы

В работе предложена общая постановка задачи структурного анализа многомерных динамических объектов (САМДО), которая формулируется как задача динамического структурного анализа данных различной природы.

В рамках вариационного подхода к задачам структурно-классификационного анализа разработан алгоритм САМДО. Проведен теоретический анализ разработанного алгоритма, доказана теорема о его сходимости. Показано, что оптимальные классификации можно искать в достаточно узком классе так называемых эталонных классификаций. Рассмотрены возможные способы реализации процедур САМДО, а также различные схемы порождения данных в этих задачах. Предложенная модель реализована в виде специального блока в составе компьютерного программно-алгоритмического комплекса, предназначенного для структурно-классификационного анализа сложно организованных данных при решении широкого класса прикладных задач [3].

Литература

[1] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Классификационный анализ данных // «Избранные труды Международной конференции по проблемам управления. Том 1», Москва: СИНТЕГ, 1999.

[2] *Bauman E. V., Dorofeyuk A. A.,* Recursive Fuzzy Clustering. // Intelligent Techniques and Soft Computing.— Aachen: Verlag Mainz. — 1997.

[3] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А., Дорофеюк Ю. А., Киселева Н. Е.* Программно-алгоритмический комплекс структурно-классификационного анализа сложноорганизованных данных // Таврич. вестник информ. и матем. — 2008. — № 1. — С. 66–72.

Оптимальные алгоритмы автоматической классификации сложно организованных данных*

Дорофеюк А. А., Киселёва Н. Е., Чернявский А. Л.
daa2@mail.ru
Москва, Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН

Предлагаются подходы к нахождению глобальных экстремумов критериев качества для ряда задач автоматической классификации. Разработан алгоритм глобально-оптимальной автоматической классификации для одномерного случая в обычной постановке и в постановке с фиксированным классом решающих правил.

The optimal complex-organized data clustering algorithms*

Dorofeyuk A. A., Kiseleva N. E., Chernyavskiy A. L.
Institute of Control Sciences named by V. A. Trapeznikov RAS, Moscow, Russia

Some approaches for quality criterion global extremum detection for a number of automatic classification problems. The globally optimal clustering algorithm for one-dimensional case is developed for standard problem statement and for statement with the fixed class of decision rules.

Среди методов классификационного анализа наибольшее развитие получили вариационные методы [1], основная идея которых состоит в оптимизации выбранного критерия качества классификации. Вопросы построения и теоретического анализа итерационных алгоритмов классификационного анализа для различных типов размытости рассмотрены в работах [1–3]. Недостатком разработанных алгоритмов является то, что они находят лишь локальные экстремумы соответствующих критериев. Это приводит в частности к сильной зависимости результатов работы алгоритмов от начальных условий. В работе предлагаются подходы к нахождению глобальных экстремумов критериев качества для ряда задач автоматической классификации. Используя специфику одномерного случая, удалось свести задачу глобальной оптимизации критерия качества одномерной классификации к схеме Беллмана, то есть воспользоваться методом динамического программирования [4].

Постановка задачи

В классификационном анализе данных базовыми являются три основных категории [1]:

— классифицируемое множество объектов,
— класс решающих правил,
— критерий качества классификации.

В качестве классифицируемого множества далее будем рассматривать конечное множество объектов, то есть подлежит классификации множество $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$.

Размытой классификацией множества X на r классов называется такая r-мерная вектор-функция $H(x) = \big(h_1(x), \ldots, h_r(x)\big)$, что для любого x значение $H(x)$ принадлежит некоторому множеству V, которое и определяет допустимый класс решающих правил (множество допустимых классификаций). Это множество является подмножеством единичного симплекса

$$I^r = \Big\{ H(x) = (h_1, \ldots, h_r) \colon \sum_{i=1}^{r} h_i = 1,\ 0 \leqslant h_i \leqslant 1 \Big\}$$

то есть $H(x) \in V \subseteq I^r \subset \mathbb{R}^r$.

Здесь $h_i(x)$ — функция принадлежности x к i-му классу. В подмножестве V сумма значений функций принадлежностей объекта ко всем классам равна единице.

В соответствии с методом обобщённого среднего [1] эффективный критерий качества классификации должен отражать близость объектов внутри классов. Вводится в рассмотрение множество возможных эталонов классов Λ. При этом предполагается, что объекты каждого класса «хорошей» классификации должны достаточно хорошо описываться некоторой моделью (эталоном) этого класса. Между элементами множества объектов X и элементами множества эталонов Λ вводится мера близости $K(x, \alpha)$, $x \in X$, $\alpha \in \Lambda$; $K(x, \alpha) \geqslant 0$. В рамках классификационного анализа обычно рассматривается следующий критерий качества классификации

$$J(H, \bar{\alpha}) = \sum_{i=1}^{r} \sum_{x \in X} K\big(x, \alpha_i\big) \varphi\big(h_i(x)\big). \qquad (1)$$

Задача классификационного анализа состоит в максимизации критерия (1) по вектор-функции $H(x)$ и по вектору эталонов классов $\bar{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_r)$, $\alpha_i \in \Lambda$ [1]. Здесь $\varphi(h)$ — монотонно возрастающая функция, отображающая отрезок [0,1] на себя, $\varphi(0) = 0$ и $\varphi(1) = 1$. Выбор функции $\varphi(h)$ и множества V обуславливает получение различных типов размытости оптимальной классификации (чёткую, размытую, с размытыми границами и др.). Наиболее используемым является вариант $V = I^r$ и $\varphi(h) = h^\lambda$, что соответствует размытому варианту алгоритма ISODATA.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты № 10-07-00210.

Для так поставленной задачи классификационного анализа данных исследован вид оптимальной классификации, разработан итерационный алгоритм её решения (основанный на поочерёдной оптимизации критерия по классификации и по эталонам классов), доказана сходимость этого алгоритма [1, 2].

Общая задача классификационного анализа данных конкретизируется для задачи автоматической классификации следующим образом. Каждый объект представляется точкой $x_i = \left(x_i^{(1)}, \ldots, x_i^{(k)}\right)$ в k-мерном пространстве параметров $\mathbb{R}^k$. Множество эталонов Λ совпадает со всем пространством $\mathbb{R}^k$, а мера близости между объектом и эталоном равна со знаком минус квадрату евклидова расстояния между ними. Таким образом, критерий (1) для задачи автоматической классификации имеет вид:

$$J(H, \bar{\alpha}) = -\sum_{x \in X} \sum_{i=1}^{r} (x - \alpha_i)^2 \varphi\big(h_i(x)\big). \qquad (2)$$

Задача классификации с фиксированным классом решающих правил

Понятие эталонной классификации является центральным для исследования вида оптимальной классификации и разработки алгоритма её нахождения.

Определение 1. *Классификация $H_{\bar{\alpha}}$ называется эталонной, если для вектора эталонов $\bar{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_r)$ выполняется соотношение*

$$H_{\bar{\alpha}}(x) = \underset{(h_1, \ldots, h_r) \in V}{\arg\max} \sum_{i=1}^{r} K(x, \alpha_i) \varphi(h_i).$$

Доказана теорема, что оптимальная для функционала (1) классификация является эталонной классификацией [1]. Следовательно, вид функционала (1) определяет решающие правила, по которым строится оптимальная эталонная классификация. В то же время часто возникают задачи, когда функционал (1) необходимо максимизировать по заданному заранее множеству классификаций. Ниже предлагается соответствующая постановка задачи классификации с заданным классом решающих правил.

Задача классификации с заданным классом решающих правил. Пусть есть два множества эталонов Λ и B и, соответственно, две функции близости $K_\Lambda(x, \alpha)$, $\alpha \in \Lambda$ и $K_B(x, \beta)$, $\beta \in B$. Рассмотрим множество всех эталонных классификаций $H_{\bar{\beta}}$, построенных по векторам $\bar{\beta} = (\beta_1, \ldots, \beta_r)$, компоненты которого являются элементами множества B. Обозначим это множество классификаций через $\Xi(B)$. Задача классификации с фиксированным классом решающих правил состоит в оптимизации критерия (1) не по всему множеству возможных классификаций, а лишь по множеству $\Xi(B)$, эталонных для множества эталонов B.

Задача классификации для конечного множества эталонов. Пусть множество возможных эталонов конечно, то есть $\Lambda = \{\alpha_1, \ldots, \alpha_m\}$. Будем считать, что эталоны разных классов не совпадают между собой. Тогда число вариантов выбора эталонов классов (с точностью до нумерации) равно числу сочетаний из m по r: C_m^r.

Если задан набор эталонов классов, то глобальная оптимизация критерия (1) по вектор-функции H производится однозначно. Таким образом, перебирая все наборы эталонов классов и подсчитывая значения критерия для соответствующих оптимальных классификаций, будет найден глобальный максимум критерия.

Подсчитаем сложность предложенного алгоритма. Число операций при нахождении оптимальной классификации при фиксированном наборе эталонов пропорционально числу объектов n, числу показателей k и числу классов r, то есть равно $A{\times}n{\times}k{\times}r$. Общее число операций алгоритма равно $C_m^r{\times}A{\times}n{\times}k{\times}r$.

Тогда такой переборный алгоритм можно использовать, если величины m и, особенно, k относительно не велики.

В частности, такой алгоритм можно использовать в случае, когда множество эталонов совпадает с множеством классифицируемых объектов ($m = n$). В большинстве случаев множество эталонов содержит исходное множество объектов. Поэтому, ограничив на первом этапе множество эталонов множеством объектов, получаем хорошее начальное условие для работы стандартного итерационного алгоритма.

Этот алгоритм годится и для классификации с фиксированным классом решающих правил. Тогда такой переборный алгоритм можно использовать, если число вариантов выбора эталонов m и, особенно, число классов r относительно не велики.

В частности, переборный алгоритм можно использовать в случае, когда множество эталонов совпадает с множеством классифицируемых объектов ($m = n$).

Особенно это эффективно для классификации (экстремальной группировки) параметров, так как обычно для лучшей содержательной интерпретации эталоны классов (факторы групп параметров) лучше искать не среди искусственных показателей, а среди исходных.

В большинстве случаев множество эталонов содержит исходное множество объектов. Поэтому, ограничив на первом этапе множество эталонов

множеством объектов, получаем хорошее начальное условие для работы стандартного итерационного алгоритма.

Заметим, что данный алгоритм без изменений годится и для классификации с фиксированным классом решающих правил.

Оптимальная одномерная классификация

Пусть требуется построить классификацию объектов, описываемых одним параметром, оптимизируя критерий качества (2). В качестве примера рассмотрим случай $\varphi(h) = h^2$. В этом случае функционал (2) перепишется в виде:

$$J(H, \bar{\alpha}) = -\sum_{x \in X} \sum_{i=1}^{r} (x - \alpha_i)^2 h_i^2(x). \qquad (3)$$

Эталоны оптимальной классификации для критерия (3) вычисляются по формуле

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^{n} \frac{x_j h_i^2(x)}{h_i^2(x)}; \quad i = 1, \ldots, r,$$

а значения функций принадлежностей классов в оптимальной классификации имеют вид:

$$h_i(x) = \frac{1}{(x - \alpha_i)^2 \sum\limits_{k=1}^{r} \dfrac{1}{(x - \alpha_i)^2}}. \qquad (4)$$

Такая постановка задачи классификации не учитывает упорядоченность точек числовой прямой. В результате в оптимальной классификации все точки (за исключением эталонов классов $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$) принадлежат с некоторым весом всем классам одновременно. Более того, функция принадлежности i-го класса $h_i(x)$ не унимодальна и имеет следующую структуру, определяемую (4):

— на отрезке $[\alpha_{i-1}, \alpha_i]$ значения $h_i(x)$ возрастают от 0 до 1;
— на отрезке $[\alpha_i, \alpha_{i+1}]$ значения $h_i(x)$ убывают от 1 до 0;
— на отрезке $[\alpha_{j-1}, \alpha_j]$, где $j \neq \{i, (i+1)\}$, значения $h_i(x)$ снова возрастают от 0 до некоторой величины $b < 1$, а затем опять убывают до 0;
— $h_i(x) \to 1/r$ при $x \to \infty$.

Вместе с тем в случае одномерной классификации естественно предполагать, что перекрываться могут только соседние классы. В соответствии с этим задачу одномерной размытой классификации необходимо ставить следующим образом: максимизируется критерий (3) как по классификации H, так и по вектору эталонов $\bar{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_r)$ при следующих ограничениях (предполагается, что $\alpha_1 \leqslant \alpha_2 \leqslant \ldots \leqslant \alpha_r$):

— если $x \leqslant \alpha_1$, то $h_1(x) = 1,\ h_j(x) = 0,\ j \neq i$;
— если $\alpha_{i-1} \leqslant x \leqslant \alpha_i$, то $h_{i-1}(x) \geqslant 0,\ h_i(x) \geqslant 0,\ h_j(x) = 0,\ j \neq \{i, (i+1)\}$;
— если $\alpha_r \leqslant x$, то $h_r(x) = 1,\ h_j(x) = 0,\ j \neq r$.

Таким образом, α_i не только эталон класса, но и граница между $(i-1)$-м и $(i+1)$-м классами.

В такой постановке критерий качества классификации (2) принимает следующий вид:

$$J(H, \bar{\alpha}) = -\sum_{x \leqslant \alpha_1} (x - \alpha_1)^2 - \sum_{i=2}^{r} \sum_{\alpha_{i-1} \leqslant x \leqslant \alpha_i} \Big((x - \alpha_{i-1})^2 \varphi\big(h_{i-1}(x)\big) + (x - \alpha_i)^2 \varphi\big(h_i(x)\big) \Big) - \sum_{\alpha_r \leqslant x} (x - \alpha_r)^2. \qquad (5)$$

Если для каждого фиксированного вектора эталонов $\bar{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_r)$ найти оптимум критерия (5) по классификации H, то получим функционал, зависящий только от вектора $\bar{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_r)$, то есть

$$J(\bar{\alpha}) = \max_H J(\bar{\alpha}, H).$$

В (5) эталоны $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ удовлетворяют принципу Беллмана, и для максимизации функционала (5) можно применять метод динамического программирования, обеспечивающий нахождение глобального экстремума этого функционала [4].

Одномерная классификация с фиксированным классом решающих правил

Рассмотрим задачу классификации множества $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$ с фиксированным классом решающих правил. При этом будем считать, что среди параметров, описывающих объекты, выделяется один параметр x, эталонные классификации по которому и определяют множество разрешённых классификаций. Обозначим значения этого параметра на элементе $x \in X$ через $t(x)$. Множество эталонов B совпадает с множеством значений этого параметра, то есть с числовой осью R. Тогда $K_B(x, \beta) = -\big(t(x) - \beta\big)^2$. С другой стороны, как и ранее, рассматривается множество эталонов Λ и мера близости $K_\Lambda(x, \alpha)$ объектов к элементам этого множества. Итак, надо максимизировать критерий (1) при условии, что классификация принадлежит множеству $\Xi(B)$.

Так же, как и в предыдущем случае будем предполагать, что перекрываться могут лишь соседние классы по параметру $t(x)$. В соответствии с этим накладываются ограничения аналогичные тем, которые были в предыдущем разделе (предполагается, что $\beta_1 \leqslant \beta_2 \leqslant \ldots \beta_r$):

— если $t(x) \leqslant \beta_1$, то $h_1(x) = 1,\ h_j(x) = 0,\ j \neq i$;
— если $\beta_{i-1} \leqslant t(x) \leqslant \beta_i$, то $h_{i-1}(x) \geqslant 0,\ h_i(x) \geqslant 0,\ h_j(x) = 0,\ j \neq \{i, (i+1)\}$;

— если $\beta_r \leqslant t(x)$, то $h_r(x) = 1,\ h_j(x) = 0,\ j \neq r$.

Таким образом, функционал (1) по аналогии с функционалом (3) можно записать в виде:

$$J(H, \bar{\alpha}) = -\Bigg(\sum_{t(x) \leqslant \beta_1} K_\Lambda(x, \alpha_1) + \\ + \sum_{i=2}^{r} \sum_{\beta_{i-1} \leqslant t(x) \leqslant \beta_i} \Big(K_\Lambda(x, \alpha_{i-1}) \varphi(h_{i-1}(x)) + \\ + K_\Lambda(x, \alpha_i) \varphi(h_i(x)) \Big) + \sum_{\beta_r \leqslant t(x)} K_\Lambda(x, \alpha_r) \Bigg). \quad (6)$$

Отличие (6) от функционала (5) состоит в том, что эталоны «отдали» часть своих функций в классификации. Роль модели i-го класса, как и ранее, играет α_i, а роль границы между $(i-1)$-м и $(i+1)$-м классами теперь уже играет не α_i (как раньше), а β_i.

Если зафиксировать эталонную классификацию (то есть зафиксировать вектор эталонов $\bar{\beta}$), то оптимальная, с точки зрения критерия (6), модель i-го класса (при фиксированном β_i) зависит не только от β_{i-1}, но и от β_{i+1}. Следовательно, в отличие от предыдущего случая, точка β_i не разбивает сумму в функционале (6) на две независимые части. Таким образом, обычная схема динамического программирования здесь не проходит.

Однако если рассмотреть пару β_{i-1} и β_i, то она разбивает функционал (6) на две независимые части. Следовательно, если прямой и обратный проходы процедуры динамического программирования [4] организовать для такой пары, то с помощью этой процедуры можно получить глобальный экстремум функционала (6).

Выводы

В работе рассмотрены модели и алгоритмы нахождения глобальных экстремумов функционалов определённого типа в задаче автоматической классификации (кластер-анализа). Для этой цели, вместо чисто переборных алгоритмов, предлагается использовать (там, где это возможно) процедуры динамического программирования Беллмана [4]. В работе показано, что задачу одномерной автоматической классификации можно свести к схеме Беллмана. Нахождение глобального экстремума позволяет, во-первых, улучшить качество получаемой классификации, а, во-вторых, для этого типа задач становится не актуальной проблема выбора наилучшей из множества классификаций, каждая из которых обеспечивает локальный экстремум соответствующего функционала. Следует подчеркнуть, что в последнее время алгоритмы глобально-оптимальной одномерной классификации находят широкое применение в экспертно-классификационных процедурах нахождения так называемых «хорошо интерпретируемых классификаций» [5].

Литература

[1] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Классификационный анализ данных // «Избранные труды Международной конференции по проблемам управления. Том 1», Москва: СИНТЕГ, 1999.

[2] *Bauman E. V., Dorofeyuk A. A.,* Recursive Fuzzy Clustering. // Intelligent Techniques and Soft Computing.— Aachen: Verlag Mainz. — 1997.

[3] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Разработка алгоритмов классификационного анализа на базе методологии стохастической аппроксимации // Третья международная конференция по проблемам управления. Пленарные доклады и избранные труды.— М.: Институт проблем управления. — 2006. — С. 364–366.

[4] *Bellman R.* Dynamic Programming and Lagrange Multipliers // Proc. USA National. Academy of Sciences.— 1956. — Vol.42 — pp. 767–769.

[5] *Дорфеюк А. А., Чернявский А. Л.* Алгоритмы построения хорошо интерпретируемых классификаций // Проблемы управления. — 2007. — № 2. — С. 83–84.

Обучение алгоритма FRiS-Pro прогнозированию характеристик, измеренных в абсолютной шкале*

Дюбанов В. В., Загоруйко Н. Г.
vladimir.dyubanov@gmail.ru, zag@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет

Рассматривается задача прогнозирования целевой характеристики Y, измеренной в абсолютной шкале. Для прогнозирования значения Y_j i-го объекта алгоритм FRiS-Pro выбирает подмножество информативных признаков X_j, описывающих данный объект. В пространстве этих признаков выбирается подмножество из k объектов обучающей выборки, наиболее похожих на i-й объект (k ближайших соседей). Мерой сходства между объектами служит функция конкурентного сходства (FRiS-функция). Прогноз получается в результате взвешенного усреднения значений Y у k ближайших соседей. Описываются методы выбора подмножеств признаков, параметра k и других параметров алгоритма FRiS-Pro. Приводится пример решения задачи на конкурсе Data Mining Cup 2009.

Learning of algorithm FRiS-Pro to forecasting of the characteristics measured in an absolute scale*

Dyubanov V. V., Zagoruiko N. G.
Sobolev Institute of Mathematics SD RAS, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

The task of forecasting of the target characteristic Y measured in an absolute scale is considered. For forecasting value Y_j of i-th object algorithm FRiS-Pro selects a subset of the informative features X_j describing given object. In space of these attributes the subset from k the objects of training sample most similar to i-th object (k the nearest neighbors) gets out. Similarity of objects is estimated via a function of rival similarity (FRiS-function). The forecast turns out as a result of the weighed averaging values Y at k the nearest neighbors. Methods of a feature selection, search of the parameter k and other parameters of algorithm FRiS-Pro are described. The example of the decision of a problemtask at competition Data Mining Cup 2009 is resulted.

Введение

На результаты предсказания или распознавания влияет большое количество различных параметров. Часто многие из этих параметров считаются заданными «по умолчанию»: используются все объекты обучающей выборки, метрика — евклидова, сходство оценивается по расстоянию, способ принятия решений — с использованием разделяющей гиперплоскости, нормировка — по среднему значению и т. д. В процессе обучения остается только выбрать заданное количество наиболее информативных признаков, подобрать их веса в уравнении разделяющей гиперплоскости и описать способ принятия решений с использованием этой гиперплоскости. Уравнение разделяющей поверхности с инструкцией по его использованию называется решающим правилом. Естественное желание увеличить число оптимизируемых параметров сдерживалось ограниченной мощностью вычислительных средств. Сейчас это ограничение ослаблено, и можно пытаться включать в алгоритмы обучения задачу выбора более широкого круга параметров, используемых в процессе принятия решений. При этом комбинаторная сложность задачи растет так быстро, что получение оптимального решения практически не достижимо, и с помощью разумных эвристических приемов ищется решение, в той или иной степени близкое к оптимальному. В данной работе рассматривается алгоритм предсказания (угадывания) неизвестных значений таблицы данных типа «объект–признак». Признаки (столбцы) делятся на описывающие $X = \langle X_1, \ldots, X_l, \ldots, X_{N_o} \rangle$ и целевые $Y = \langle Y_1, \ldots, Y_j, \ldots, Y_{N_g} \rangle$. Для части объектов (строк) известны значения как описывающих, так и целевых признаков. Эта часть объектов называется обучающей выборкой $A_o = \langle a_1, \ldots, a_i, \ldots, a_{M_o} \rangle$. Остальные объекты составляют контрольную выборку $A_g = \langle b_1, \ldots, b_i, \ldots, b_{M_g} \rangle$. Их описывающие признаки известны, а целевые не известны. Задача состоит в том, чтобы по обучающей выборке обнаружить зависимости между значениями описывающих и целевых признаков и использовать эти зависимости для предсказания значений целевого признака любого объекта b_i контрольной выборки. Предлагаемый алгоритм FRiS-Pro включает в себя некоторые исходные положения и параметры. Значения последних выбираются в процессе обучения. Исходные положения состоят в следующем:

1. Способ принятия решений основан на гипотезе об «аналогичности»: объекты, похожие по n признакам, обычно похожи и по $(n+1)$-му признаку.

2. Для предсказания значений каждого целевого признака Y_j используется свое подмножество X_j

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 08-01-00040.

наиболее информативных («компетентных») признаков, количество n которых определяется в процессе обучения.

3. Для предсказания значения целевого признака каждого контрольного объекта b_i будет использоваться свое подмножество M_i наиболее похожих на него («компетентных») объектов, количество k которых определяется в процессе обучения.

4. Сходство между объектами будет оцениваться с помощью функции конкурентного сходства (FRiS-функции). Обоснование этих положений будет дано ниже.

В процессе обучения будут определяться значения следующих параметров:

5. L — вид метрики: L_1 или L_2;

6. W_1 — способ нормировки значений строки: отсутствие нормировки, нормировка по максимальному или по среднему значению;

7. W_2 — способ нормировки значений описывающего признака: отсутствие нормировки, нормировка по максимальному или среднему значению;

8. k — число компетентных объектов (ближайших соседей);

9. O — способ округления результата предсказания до целого числа: в большую или в меньшую сторону.

Обоснование исходных положений

1. Функция конкурентного сходства успешно используется для решения задач распознавания образов, в которых требуется предсказывать значение целевого признака, измеряемого в номинальной шкале [1]. Кратко напомним определение FRiS-функции. Человеческое восприятие сходства носит относительный характер. Чтобы ответить на вопросы типа «близко–далеко?», «похож–не похож?» нужно знать ответ на вопрос «по сравнению с чем?». Чтобы оценить сходство объекта z с эталоном первого образа, нужно знать не только расстояние r_1 до него, но и расстояние r_2 до того образа, который является его ближайшим конкурентом. Мера сходства является функцией от этих двух расстояний, и может измеряться в шкале порядка, как это делается в методе ближайшего соседа (kNN). Но знанием величин r_1 и r_2 можно распорядиться и более эффективно, если оценивать сходство в абсолютной шкале. Для этого можно использовать функцию F, которая называется функцией конкурентного сходства или FRiS-функцией (от «Function of Rival Similarity»):

$$F(z, 1 \,|\, 2) = \frac{r_2 - r_1}{r_2 + r_1}. \qquad (1)$$

Здесь величина $F(z, 1 \,|\, 2)$ характеризует сходство объекта z с эталоном первого образа в конкуренции с эталоном второго образа. Значения этой функции меняются в пределах от $+1$ до -1. При расстояниях $r_1 = r_2$ значения $F(z, 1 \,|\, 2) = F(z, 2 \,|\, 1) = 0$, что указывает на границу между образами. Полезность применения FRiS-функции в задачах распознавания образов показана в ряде работ [2, 3]. Здесь описана возможность применения FRiS-функции при решении задачи прогнозирования целевого признака, измеренного в абсолютной шкале, т. е., хорошо известной задачи регрессионного анализа.

2. Гипотеза «аналогичности» с успехом используется во всех алгоритмах распознавания и прогнозирования.

3. Использование «компетентного» подмножества из $n < N$ признаков (по сравнению с использованием всех N описывающих признаков) повышает статистическую обусловленность задачи и улучшает качество предсказаний. В данной работе для выбора признаков используется алгоритм GRAD, хорошо зарекомендовавший себя при решении задач распознавания. [4, 5]. Ядром этого алгоритма является итеративная процедура AdDel, в которой чередуются процессы добавления (Addition) к имеющейся подсистеме n_1 самых эффективных признаков и исключения (Deletion) из подсистемы n_2 наименее эффективных признаков ($n_2 < n_1$). Эффективность текущей подсистемы оценивается по результатам предсказания целевого признака обучающих объектов в режиме Leave One Out (LOO). С ростом размерности n эффективность подсистемы растет, достигает максимального значения и начинает уменьшаться. Процесс останавливается на такой подсистеме, добавление к которой любых оставшихся признаков не повышает ее эффективность. Это означает, что GRAD автоматически выбирает как состав, так и количество n компетентных признаков. Более того, один и тот же признак может оказаться включенным в подсистему более одного раза. Количество таких вхождений можно считать оценкой важности (веса) признака. При определении расстояния между объектами вклад каждого признака пропорционален его весу.

4. При выборе признаков («предикторов») для построения регрессионных уравнений обычно используется информация обо всех M объектах, содержащихся в таблице данных. Такой же «глобальный» подход применяется и в методах заполнения пропусков в таблице, которые в литературе известны под названиями «Inserting» и «Imputation» [6, 7]. Данная работа основана на «локальном» подходе, аналогичном тому, который используется в алгоритме ZET [4]. При этом подходе во избежание получения «средней температуры по больнице» используется взаимосвязь между элементами таблицы в ограниченной окрестности заполняемого элемента. Эту окрестность составляют значения n компетентных признаков у k компетентных объектов.

Решающее правило

Рассматривается конечное число вариантов решающих правил D_v, $v = 1, \ldots, V$, по которым предсказываются значения элементов b_{ij}. Правило D_v включает в свой состав следующие элементы:

— набор P_v конкретных значений выбираемых параметров: $P_v = \langle L_v, W_{1v}, W_{2v}, n_v, k_v, O_v \rangle$;

— подмножество X_{jv} из $n < N$ компетентных признаков, выбранных алгоритмом GRAD;

— подмножество M_{iv} из $k < M_o$ компетентных объектов обучающей выборки, наиболее похожих на i-ю строку по признакам X_{jv}.

Каждое такое правило $D_v = \langle P_v, X_{jv}, M_{iv} \rangle$ вырабатывает свой вариант b_{ijv} значения предсказываемого элемента b_{ij}. Он равен средневзвешенному значению элементов b_{tj} целевого признака у k компетентных объектов ($t = 1, \ldots, k$):

$$b_{ijv} = \sum_t b_{tj} S_t \Big/ \sum_t S_t. \qquad (2)$$

Компетентность S_t объекта равна величине его конкурентного сходства с контрольным объектом. Сложность оценки этой величины состоит в том, что в данной задаче, в отличие от задач распознавания, нет конкурирующих классов, и потому нельзя определить расстояние r_2, необходимое для применения формулы (1). По этой причине формируется виртуальный конкурирующий класс из k объектов, которые по расстоянию от объекта b_i следуют сразу за k компетентными объектами. Среднее расстояние от b_i до k объектов виртуального класса-конкурента принимается за расстояние r_2. Теперь, зная расстояние r_{1t} от объекта b_i до t-го компетентного объекта, можно найти величину его конкурентного сходства с объектом b_i:

$$F_t = \frac{r_2 - r_{1t}}{r_2 + r_{1t}}.$$

Эта величина служит мерой компетентности t-го объекта: $S_t = F_t$.

Обучение алгоритма FRiS-Pro

Цель обучения состоит в выборе наилучшего сочетания значений выбираемых параметров. При фиксированных значениях параметров P_v компетентные признаки X_{jv} алгоритм GRAD выбирает путем направленного перебора вариантов подсистем растущей размерности. Оценка информативности каждого варианта определяется методом скользящего экзамена LOO. Для этого каждый объект a_i обучающей выборки по очереди становится контрольным объектом. Для него выбирается подмножество M_{iv} из k компетентных объектов, оценивается величина их компетентности S_t, и по формуле (2) определяется значение целевого признака a_{ijv}. Модуль разности $d_{iv} = |a_{ij} - a_{ijv}|$ добавляется в счетчик штрафа C_v. Сумма штрафов, накопившихся после прохождения через эту процедуру всех M_o обучающих объектов, служит оценкой качества текущего варианта признакового подпространства. GRAD останавливается на варианте подсистемы X_{jv}, которой соответствует минимальное значение C_v. Такая процедура выбора X_{jv}, M_{iv} и оценки C_v повторяется для всех V сочетаний значений параметров набора P. Если наибольшее значение параметра k принять равным K, то общее количество сравниваемых вариантов $V = 2 \cdot 3 \cdot 3 \cdot K \cdot 2 = 36K$. Заметим, что исходная система признаков может быть избыточной, и алгоритм GRAD по желанию пользователя может выдавать не одно, а Q разных подсистем компетентных признаков. Использование каждой такой подсистемы X_{jq}, $q = 1, \ldots, Q$ порождает свое решающее правило D_{vq}. В итоге в нашем распоряжении оказывается V_Q решающих правил. Каждое из них выдает свои варианты решений на контрольной выборке. Возникает естественное желание от этих частных решений перейти к коллективному решению. Такая задача рассматривается в актуальном сейчас направлении «сплава решающих правил» (decision fusion rules) [8]. Мы строим коллективное правило следующим способом. Будем рассматривать каждое частное правило D_{vq} в качестве «вторичного признака», который принимает свое значение (т. е. выдает свой вариант предсказываемой величины) на каждом объекте. Тогда с помощью того же алгоритма GRAD можно выбрать компетентное коллективное решающее правило D в виде наилучшего сочетания этих «признаков» и указать их веса. Вес правила равен количеству его вхождений в коллективное правило. Коллективное решение равняется средневзвешенному значению решений, полученных частными правилами, входящими в компетентный коллектив. Созданием такого коллективного решающего правила D заканчивается процесс обучения.

Обобщая сказанное, можно представить себе алгоритм FRiS-Pro, состоящим из следующих крупных блоков:

1. Блок выбора подмножества X_j из n компетентных признаков, в котором используются алгоритм направленного перебора вариантов GRAD и алгоритм LOO для оценки качества вариантов;

2. Блок выбора подмножества M_i из k компетентных объектов по величине конкурентного сходства между объектами и получения по частному решающему правилу варианта значения предсказываемой величины;

3. Блок формирования коллективного решающего правила D из частных правил и получения итогового значения предсказываемой величины b_{ij}.

Основное время тратится на первый блок, трудоемкость которого равна $L = C \cdot m^3 \cdot M_o^2$. Здесь m — параметр алгоритма GRAD, $m \ll N$.

Процедура предсказания

Вначале каждое частное правило D_{vq}, входящее в коллектив, вырабатывает свой вариант предсказания значения b_{ij} для объекта b_i контрольной выборки. Для этого при параметрах P_{vq} и признаках X_{jvq} ищется подмножество M_{ivq} из k объектов обучающей выборки, наиболее похожих на b_i, оценивается их компетентность (вес) и вычисляется средневзвешенное значение целевого признака этих объектов по формуле (2). Получается vq-й вариант искомой величины b_{ij}. Затем такие частные решения усредняются с весами, равными числу вхождений частного правила в коллективное правило D. Представляет интерес дисперсия значений, которые получены членами коллектива. В работе [9] высказывается гипотеза о том, что ее можно использовать для оценки надежности полученного решения: чем больше эта дисперсия, тем выше вероятность того, что полученное решение сильно отклоняется от истинного.

Решение конкурсной задачи

Конкурсы Data Mining Cup проводятся ежегодно накануне Международной Конференции по анализу данных и машинному обучению (KDD/ML). Задача конкурса 2009 года состояла в анализе данных о книжной торговле. Эти данные представляли собой таблицу, в которой строками (объектами) являлись магазины ($M = 4812$), а N столбцами (признаками) — жанры книг ($N = 1864$). На пересечении строки и столбца указывалось количество книг данного жанра, проданных в течение года в этом магазине. Эти количества имели значения от 0 до 2300, причём 84% ячеек таблицы имели нулевое значение. Последние 8 признаков являлись целевыми. Таблица была разделена на два слоя: обучающий (2394 магазина) и контрольный (2418 магазинов). Для обучающих объектов значения восьми целевых признаков были известны, а для контрольных объектов их нужно было предсказать. Это означает, что нужно было предсказывать значения целевых признаков в 19344 ячейках матрицы размером 2418×8. Предсказания делались нами для каждого целевого признака отдельно. Среднее количество n компетентных признаков для этих 8 однотипных, но разных задач, колебалось от 10 до 20. Значения каждого признака нормировались по их средней величине. Наилучшие количества компетентных строк k находились в пределах от 3 до 10. Количество правил Q в коллективных решающих правилах менялось от 13 до 25. На решение каждой из 8 задач требовалось около 250 часов работы одного процессора. Для данной задачи, решаемой один раз в год, время решения не имеет большого значения. Кроме того, все наиболее трудоемкие фрагменты алгоритма хорошо распараллеливаются, и время решения уменьшается, практически, линейно от числа используемых процессоров. В конкурсе приняла участие 231 команда из 42 стран. Качество решения оценивалось суммой модулей разностей между фактическими и предсказанными значениями в каждой из 19344 ячеек. У пяти команд средняя ошибка на каждую ячейку была меньше единицы. Наша команда Новосибирского Университета сделала 0,95 ошибки на ячейку и заняла 4-е место [10].

Заключение

Полученные результаты подтверждают возможность и целесообразность расширения количества оптимизируемых параметров решающего правила и использования FRiS-функции не только в алгоритмах распознавания, но и алгоритмах прогнозирования количественных переменных.

Литература

[1] *Zagoruiko N. G., Borisova I. A., Dyubanov V. V., Kutnenko O. A.* Methods of Recognition Based on the Function of Rival Similarity // Pattern Recognition and Image Analysis, — 2008. — Vol. 18. — Pp. 1–6.

[2] *Загоруйко Н. Г.* Интелллектувльный анализ данных, основанный на функции конкурентного сходства // Автометрия. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 31–40.

[3] *Загоруйко Н. Г., Борисова И. А., Дюбанов В. В., Кутненко О. А.* Сходство и компактность // Математические методы распознавания образов, ММРО-14, Суздаль. — 2009. — С. 89–92.

[4] *Загоруйко Н. Г.* Прикладные методы анализа данных и знаний. — Новосибирск: ИМ СО РАН. — 1999. — 276 с.

[5] *Загоруйко Н. Г., Кутненко О. А.* Алгоритм GRAD для выбора информативных признаков // Вычислительные системы. — 2005. — Т. 174, — Новосибирск: ИМ СО РАН. — С. 3–12.

[6] *Литтл Р. Дж. А., Рубин Д. И.* Статистический анализ данных с пропусками. — Москва: «Финансы и статистика». — 1991.

[7] *Лапко А. В., Лапко В. А.* Анализ непараметрических алгоритмов распознавания образов в условиях пропуска данных // Автометрия. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 65–74.

[8] *Zhu Y., Li X. R.* Optimal Decision Fusion Given Sensor Rules // Proc. of International Conference on Information Fusion, Silicon Valley, CA, USA. — 1999.

[9] *Журавлев Ю. И., Загоруйко Н. Г.* Дисперсионный критерий для оценки достоверности решения при прогнозировании и распознавании с использованием коллективно-групповых решающих правил // Вычислительные системы. — 1998, — Т. 163. — Новосибирск: ИМ СО РАН. — С. 3—11.

[10] `http://www.prudsys.de/Service/Downloads/bin/`.

Когнитивный анализ данных, основанный на использовании FRiS-функции*

Загоруйко Н. Г.
zag@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет

Методы когнитивных вычислений должны обладать прозрачностью и выдавать легко интерпретируемые результаты. Использование функции конкурентного сходства (FRiS-функция) позволяет создавать методы анализа данных, отвечающие этим требованиям. Дается краткое описание существующих методов, использующих конкурентное сходство между объектами. Приводятся примеры их применения при решении модельных и реальных задач из области биоинформатики.

Cognitive data analysis based on use FRiS-function*

Zagoruiko N. G.
Sobolev Institute of Mathematics SD RAS, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

Methods of cognitive computations should possess a transparency and give out easily interpretable results. The function of rival similarity (FRiS-function) allows to create methods of the data analysis that meet these requirements. The brief description of the existing methods that use rival similarity between objects is given. Examples of their application for model and real tasks from the field of bioinformatics are considered.

Введение

Термин «когнитивные вычисления» подчеркивает необходимость ориентации на человека, как на объект изучения его когнитивных механизмов, так и на субъект — потребителя результатов анализа данных. Этому способствуют два обстоятельства. Во-первых, стало ясно, что решение новых стратегических задач в экономике и обороне невозможно без ускоренного повышения интеллектуального уровня технических средств наблюдения, анализа и управления. Во-вторых, даже современная сложность функционирования этих средств и характер получаемых результатов часто превышают возможности человека понимать как процесс получения результата, так и сам результат. В этих условиях человек, фактически,исключается из человеко-машинной системы управления.

В данной работе описывается подход к построению методов анализа данных, который удовлетворяет указанным требованиям когнитивных вычислений. Подход основан на использовании новой меры относительного, конкурентного сходства, которая имитирует человеческий способ оценки сходства между объектами. Методы анализа данных, основанные на этой мере сходства, обладают прозрачностью и описывают результаты в наглядной для человека форме.

Напомним, что при оценке сходства объекта z с объектом a при наличии других объектов важно знать не только расстояние r_1 от z до a, но и расстояние r_2 от z до другого ближайшего к нему объекта b. В условиях этой конкуренции относительная мера сходства z с a определяется уравнением

$$F(z, a \,|\, b) = \frac{r_2 - r_1}{r_2 + r_1}. \qquad (1)$$

Мы называем эту меру функцией конкурентного сходства или FRiS-функцией (Function of Rival Similarity). При совпадении z с a имеем $F(z, a \,|\, b) = 1$, при совпадении z с конкурентом b $F(z, a \,|\, b) = -1$. Значения FRiS на границе равны 0. Эта мера сходства оказалась полезной для построения алгоритмов анализа данных разного типа [1].

Решающие функции, используемые человеком

Обеспечение прозрачности формальных методов анализа требует изучения механизмов, которые использует человек в процессе принятия решений. В экспериментах, описанных в [2], изучались вид и сложность решающих правил, которыми пользуется человек. Выяснилось, что человек в двумерном пространстве может представить себе только линейную границу в виде горизонтальной или вертикальной линии. Результаты эксперимента с аналогичной задачей в трехмерном пространстве показали, что человек не в состоянии представить себе даже широкий линейный разделительный коридор между образами, если он наклонен к координатным осям.

В опытах по восприятию речевых сигналов было обнаружено, что разделение гласных звуков по частоте двух первых формант слушатели делают с помощью прямых линий, перпендикулярных координатным осям. Наблюдения за работой операторов, использующих методы классификации и распознавания, показали, что человек в состоянии понимать результаты и включать свой опыт и интуицию в процесс принятия решений в двух случаях:

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №08-01-00040.

если классы объектов описаны пороговыми значениями координат, или если образы представлены их типичными образцами (эталонами, прецедентами). Еще лучше, если есть и то и другое — типичные образцы и коридоры допустимых значений вокруг этих образцов по каждой из небольшого числа координат.

Описанные результаты подтверждают известную распознавателям истину о том, что нужно сосредоточить основные усилия на выборе небольшого количества таких признаков, в пространстве которых распознаваемые классы надежно описываются простыми решающими правилами. Несколько неожиданным было только то, что человеческие решающие правила оказались столь примитивными. А замечательные классификационные способности человека объясняются его умением выбирать высокоинформативные признаки и представительные эталоны.

Рассмотрим способы использования FRiS-функции при решении этих двух задач.

Компактность и информативность

Все классификационные методы анализа данных основаны на использовании гипотезы компактности [3], формулировка которой обычно апеллируют к интуитивному, не формальному представлению о компактности. Интересная попытка приблизиться к количественной оценке компактности содержится в работе [4]. Применение FRiS-функции позволяет получать количественную оценку компактности, как отдельного образа, так и системы образов [5].

Компактность образа A будет тем больше, чем больше сходство объектов этого образа между собой и чем больше их отличие от объектов других образов. При оценке сходства объекта a_i со своим ближайшим соседом a_j в качестве расстояния r_1 используется расстояние между этими объектами. Расстоянием r_2 считается расстояние от a_i до объекта b_i, который является ближайшим к a_i объектом любого другого образа B. Сходство $F(a_i, a_j \,|\, b_i)$ вычисляется по формуле (1). При оценке отличия объекта a_i от чужого ближайшего объекта b_i расстояние между ними считается равным r_2, а расстоянием r_1 служит расстояние от b_i до ближайшего к нему объекта b_q образа B. Сумма C_i величин $F(a_i, a_j \,|\, b_i)$ и $F(a_i, b_i \,|\, b_q)$ показывает, насколько сильно объект a_i похож на своих и отличается от чужих объектов. После того, как все M_A объектов образа A побывают в роли объекта a_i, можно получить оценку компактности C_A этого образа в виде среднего значения величин C_i. Общая оценка C компактности K образов равна среднему значению компактностей всех образов. Компактность тем больше, чем выше плотность объектов внутри образа и чем дальше образы отстоят друг от друга. По этой причине величина C используется нами в качестве критерия информативности в алгоритме выбора признаков GRAD [5].

Выбор эталонов

Для распознавания контрольного объекта используются меры его сходства с эталонными представителями («столпами») каждого образа. Алгоритм FRiS-Stolp [6] в качестве столпа образа A выбирает объект a_i, который обладают высокими значениями его «обороноспособности» (высокой степенью сходства с ним других объектов образа A) и «толерантности» (большим отличием от объектов других образов).

Процесс выбора столпа аналогичен процессу оценки компактности. Отличие состоит в том, что для определения обороноспособности объекта a_i оценивается сходство с ним не одного, а всех объектов образа A. Точно также, при определении толерантности оценивается отличие a_i не от одного соседа b_i, а от всех чужих объектов. Максимальная сумма C_i всех этих сходств и отличий позволяет выбрать объект a_i на роль первого столпа образа A. Под его защиту отбираются m_i объектов, сходство которых со столпом превышает заданный порог F^*. Если $m_i < M_A$, то для остальных объектов выбор повторяется. В результате для каждого t-го образа выбирается от одного до k_t столпов, стоящих в центрах локальных сгустков объектов. Чем выше компактность, тем меньше k_t.

Распознавание контрольного объекта состоит в оценке его сходства со всеми столпами. Решение принимается в пользу образа, со столпом которого сходство оказалось максимальным. Это эквивалентно распознаванию с помощью кусочно-линейной границы между образами. Отличие в том, что человеку проще представить себе структуру образа по небольшому числу объектов-столпов, чем по кусочно-линейной границе в многомерном пространстве.

Выбор признаков

В алгоритме FRiS-GRAD [6] используется релаксационная процедура AdDel в виде чередования двух жадных алгоритмов: добавления (Add) n_1 наиболее полезных признаков и исключения (Del) $n_2 < n_1$ наименее полезных. Информативность каждого варианта системы из n признаков оценивается по компактности образов C в пространстве этих признаков. Первичные признаки ранжируются по индивидуальной информативности и из множестве m самых информативных формируются группы признаков (гранулы) в виде всех пар и всех троек признаков. После этого процедура AdDel выбирает наиболее информативное подмножество гранул. С ростом размерности подмножества n информативность растет, достигает макси-

Таблица 1. Результаты сравнения.

Задача	N_0	m_1/m_2	P: max/GRAD
ALL1	12625	95/33	100.0/100.0
ALL/AML	7129	47/25	94.8/98.6
Prostate	12625	50/53	90.2/90.2
DLBCL	7129	58/19	94.3/92.2
Colon	2000	22/40	80.8/83.9
ALL4	12625	26/67	82.1/81.7
Myeloma	12625	36/137	78.2/78.6
ALL3	12625	65/35	59.1/66.0
ALL2	12625	24/101	71.5/80.8
Ср. значение			76.3/85.8

мума и затем начинает уменьшаться. Это позволяет автоматически выбирать как состав, так и наилучшее количество признаков.

Преимущество критерия C по сравнению с количеством ошибок при скользящем экзамене демонстрировалось на ряде модельных и реальных задач. В работе [7] представлены результаты сравнения 10 разных методов выбора признаков при решении 9 задач из области биоинформатики. Количество признаков N_0 в них на порядки превышало количество объектов M обучающей выборки. Отношение количества объектов m_1 в одном образе к количеству m_2 в другом доходило до $1:5$. Признаки выбирались на 50% случайно выбранных обучающих объектов. Качество выбранных признаков проверялось на второй половине выборки. Процедура повторялась 10 раз в режиме Cross Validation. Все представленные методы выбора признаков основаны на предположении о независимости признаков. Некоторые методы учитывали различия в дисперсиях распределений образов. Для распознавания по выбранным признакам использовалось 4 решающих правила: Support Vector Machine (SVM), Between Group Analysis (BGA), Naive Bayes Classification (NBC) и k Nearest Neighbors (kNN).

В таблице 1 представлены параметры задач, и для каждой задачи результаты, показанные лучшим из 10 методов выбора признаков в сочетании с методом SVM. Наилучшие результаты показал метод Empirical Bayes Statistic (EBS) [8]. Здесь же приведены результаты решения этих задач алгоритмом FRiS-GRAD, в котором выбор признаков и распознавание основаны на использовании FRiS-функции. Если просуммировать порядковые места, занятые методами на каждой из 9 задач при использовании SVM, то получатся величины от 33 для наиболее успешного метода EBS до 48 для наименее успешного метода Fold Change (FC).

Алгоритм FRiS-GRAD, учитывающий зависимости между признаками, показал лучший результат на 7 задачах и набрал сумму мест, равную 15.

Заключение

FRiS-функцию можно использовать в качестве унифицированной основы при построении эффективных методов решения задач анализа данных всех основных типов. При этом она обеспечивает хорошую согласованность с требованиями когнитивных вычислений, касающихся прозрачности процесса получения решения и интерпретируемости полученных результатов.

Благодарности

Выражаю большую благодарность моим коллегам Борисовой И. А., Дюбанову В. В. и Кутненко О. А. за участие в разработке описанных методов и за создание экспериментальных программ.

Литература

[1] *Zagoruiko N. G., Borisova I. A., Dyubanov V. V., Kutnenko O. A.* Methods of Recognition Based on the Function of Rival Similarity // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2008. — Vol. 18. — Pp. 1–6.

[2] *Загоруйко Н. Г.* Какими решающими функциями пользуется человек? // Вычислительные системы. — 1967. — Т. 28, — Новосибирск, ИМ СО РАН. — С. 69–78.

[3] *Лапко А. В., Лапко В. А.* Анализ распознавания образов в условиях пропуска данных // Автометрия. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 65–74.

[4] *Воронцов К. В.,Колосков А. О.* Профили компактности и выделение опорных объектов в метрических алгоритмах классификации // Искусственный Интеллект. — 2006. — С. 30–33.

[5] *Загоруйко Н. Г., Борисова И. А., Дюбанов В. В., Кутненко О. А.* Сходство и компактность // 14-я всеросс. конф. Математические методы распознавания образов, Суздаль. — 2009. — С. 89–92.

[6] *Zagoruiko N. G., Borisova I. A., Dyubanov V. V., Kutnenko O. A.* Attribute selection through decision rules construction (algorithm FRiS-GRAD) // Proc. of 9th Intern Conf. Pattern Recognition and Image Analysis: New Information Technologies, Nizhni Novgorod. — 2008. — Vol. 2. — Pp. 335–338.

[7] *Jeffery I., Higgins D., Culhane A.* Comparison and evaluation of methods for generating differentially expressed gene lists from microarray data // `http://www.biomedcentral.com/1471-2105/7/359`

[8] *Smyth G.* Linear Models and Empirical Bayes Methods for Assessing Differential Expression in Microarray Experiments // Statistical Applications in Genetics and Molecular Biology. — 2004. — Vol. 3. — No. 1.

Метод бикластеризации на основе объектных и признаковых замыканий*

Игнатов Д. И., Каминская А. Ю., Кузнецов С. О., Магизов Р. А.
dignatov@hse.ru
Москва, Государственный Университет — Высшая Школа Экономики

Разработан новый метод бикластеризации объектно-признаковых данных, основанный на объектных и признаковых замыканиях из анализа формальных понятий (АФП). Предлагается опеределение бикластера, исследуются его свойства и связь с решетками формальных понятий. Приводится оценка ресурсной сложности двух версий алгоритмов для порождения бикластеров данного вида. Преимущества предлагаемого подхода перед алгоритмами поиска формальных понятий (ФП) заключается в меньшем размере выхода и более высокой производительности при условии «сохранения» ФП в смысле отношения покомпонентного вложения, определенного на ФП и бикластерах. Приведены результаты экспериментов на массивах данных из UCI Machine Learning Repository. Исследуются свойства масштабируемости алгоритмов на примере параллельной реализации.

A concept-based biclustering algorithm*

Ignatov D. I., Kaminskaya A. Y., Kuznetsov S. O., Magizov R. A.
State University Higher School of Economics, Moscow, Russia

A novel biclustering algorithm based on closure operator is proposed. Definition of a bicluster is given, its properties and relation to formal concept from Formal Concept Analysis (FCA) are studied. Complexities of two versions of the algorithm are compared. Experimental results on datasets from the UCI Machine Learning Repository are given. Scalability of the parallel implementations of the algorithm is studied.

В настоящее время методы бикластеризации завоевывают все большую популярность, особенно среди исследователей в области биоинформатики для изучения данных генной экспрессии [5]. Это вызвано потребностью в сохранении объектно-признаковой структуры кластеров, например, для адекватного понимания, в каких свойствах выражено сходство некоторой группы генов. Различные приложения этих методов востребованы в области анализа Интернет-данных, например, такие алгоритмы — основа некоторых рекомендательных Интернет-сервисов [6, 4]. В данной работе мы представляем метод бикластеризации, основанный на решетках формальных понятий. Благодаря средствам анализа формальных понятий (АФП) [3] для любых объектно-признаковых данных можно построить иерархическую структуру формальных понятий (бикластеров специального вида), позволяющую отобразить их таксономические свойства в удобном для аналитика виде. Основным недостатком решеток понятий является их большой размер, например, для объектно-признаковой таблицы размером 10×10 число таких бикластеров в худшем случае равно 2^{10}. Одной из задач, на решение которой направлены усилия ученых, работающих в данном сообществе, является разработка методов по отбору наиболее полезных, релевантных понятий, сокращению размеров порождаемого множества понятий. Один из подходов заключается в ослаблении требований к формальным понятиям; в его рамках возможно не только сокращение числа порождаемых бикластеров, но и успешное устранение влияния шума на результаты [2]. Нами предлагается метод бикластеризации, который использует только небольшую часть формальных понятий (объектные и признаковые) для порождения бикластеров особого вида. В качестве критерия отбора релевантных бикластеров применяется их плотность. Предлагаются два подхода к реализации метода — по определению и улучшенный, на основе свойства монотонности оператора Галуа. Проводятся эксперименты на реальных данных, иллюстрирующие улучшение производительности благодаря оптимизации и распараллеливанию при различных порогах плотности.

Основные определения

Определение 1. *Формальный контекст* $\mathbb{K}$ *есть тройка* (G, M, I), *где* G *— множество, называемое множеством объектов,* M *— множество, называемое множеством признаков,* $I \subseteq G \times M$ *— отношение.*

Отношение I интерпретируется следующим образом: для $g \in G$, $m \in M$ имеет место gIm, если объект g обладает признаком m.

Для формального контекста $\mathbb{K} = (G, M, I)$ и произвольных $A \subseteq G$ и $B \subseteq M$ определена пара отображений:

$$A' := \{m \in M \mid gIm \text{ для всех } g \in A\},$$
$$B' := \{g \in G \mid gIm \text{ для всех } m \in B\},$$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №08-07-92497-НЦНИЛ_а.

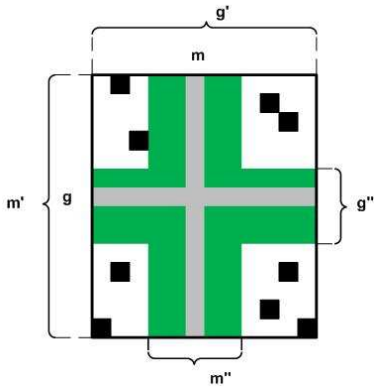


Рис. 1. Бикластер на основе объектных и признаковых замыканий.

которые задают *соответствие Галуа* между частично упорядоченными множествами $(2^G, \subseteq)$ и $(2^M, \subseteq)$, а оператор $(\cdot)''$ является *оператором замыкания* на $G \dot\cup M$ — дизъюнктном объединении G и M, т. е. для произвольного $A \subseteq G$ или $A \subseteq M$ имеют место следующие соотношения [1]:

1) $A \subseteq A''$ (экстенсивность);
2) $A'''' = A''$ (идемпотентность);
3) если $A \subseteq C$, то $A'' \subseteq C''$ (изотонность).

Множество A называется *замкнутым*, если $A'' = A$ [1].

Определение 2. *Формальное понятие формального контекста $\mathbb{K} = (G, M, I)$ есть пара (A, B), где $A \subseteq G$, $B \subseteq M$, $A' = B$ и $B' = A$. Множество A называется объёмом, а B — содержанием понятия (A, B).*

Очевидно, что объем и содержание произвольного формального понятия являются замкнутыми множествами.

Множество формальных понятий контекста $\mathbb{K}$, которое мы будем обозначать через $\mathfrak{B}(G, M, I)$, частично упорядочено по вложению объёмов: формальное понятие $X = (A, B)$ является *менее общим* (*более частным*), чем понятие $Y = (C, D)$, $(A, B) \leqslant (C, D)$, если $A \subseteq C$, что эквивалентно $D \subseteq B$ (Y — *обобщение* X).

Описание модели бикластеризации и алгоритмов

Рассмотрим алгоритм для предложенного нами определения бикластера. Предварительно введем определения объектного и признакового понятия.

Определение 3. *Объектным понятием формального контекста $\mathbb{K} = (G, M, I)$ называется формальное понятие вида (g'', g'), где $g \in G$, а признаковым понятием называется формальное понятие вида (m', m''), где $m \in M$.*

Обозначим множество всех объектных понятий формального контекста $\mathbb{K} = (G, M, I)$ как $Obj = \{(g'', g') \mid \forall g \in G\}$, а множество всех признаковых понятий как $Attr = \{(m', m'') \mid \forall m \in M\}$.

Определение 4. *Для формального контекста $\mathbb{K} = (G, M, I)$ и любой пары объектных и признаковых понятий $(g'', g') \in Obj$ и $(m', m'') \in Attr$, связанных отношением вложения $(g'', g') \preceq (m', m'')$, назовем бикластером пару вида (m', g'), см. рис. 1.*

Требование вложения объектного понятия (g'', g') в признаковое (m', m'') объясняется тем фактом, что объектные понятия имеют самые большие по размеру содержания, а признаковые — самые большие объемы.

Определение 5. *Плотностью бикластера (A, B) формального контекста $\mathbb{K} = (G, M, I)$ назовем величину $\rho(A, B) = \frac{|I \cap A \times B|}{|A||B|}$.*

Очевидно, что для произвольного бикластера (A, B) справедливо соотношение $0 \leqslant \rho \leqslant 1$.

Следствие 1. *Пусть (A, B) — формальное понятие, тогда $\rho(A, B) = 1$*

Определение 6. *Пусть дан бикластер $(A, B) \in \in 2^G \times 2^M$ и положительное целое число $\rho_{\min}$ такое, что $0 \leqslant \rho_{\min} \leqslant 1$. Тогда (A, B) называется плотным в том и только том случае, когда он удовлетворяет ограничению*

$$C_{\text{dense}}(\rho_{\min}, (A, B)) \equiv (\rho(A, B) \geqslant \rho_{\min}).$$

Определение 7. *Отношение вложения на бикластерах определим покомпонентно: $(X_1, Y_1) \sqsubseteq (X_2, Y_2) \Leftrightarrow X1 \subseteq X2$ и $Y1 \subseteq Y2$. Ограничение называется антимонотонным по отношению $\sqsubseteq$ тогда и только тогда, когда для пары бикластеров b_1 и b_2, таких что $b1 \subseteq b2$ выполняется $C(b_2) \Rightarrow C(b_1)$. Двойственным образом определяется монотоннсть ограничения. Запись $C(b)$ означает, что ограничение C выполняется для бикластера b.*

Утверждение 1. *Данное ограничение не является ни монотонным, ни антимонотонным.*

Пусть $\rho_{\min} = 0$, тогда для любого формального понятия некоторого контекста $\mathbb{K}$ существует бикластер из множества всех бикластеров данного контекста $\mathbf{B}$, в который оно вкладывается.

Утверждение 2. *Для любого $(A_c, B_c) \in \mathfrak{B}(G, M, I)$ найдётся $(A_b, B_b) \in \mathbf{B}$ такой, что $(A_c, B_c) \sqsubseteq (A_b, B_b)$.*

Тот факт, что бикластер представим в виде (m', g') наводит на мысль о том, что возможно избежать дорогостоящего (в худшем случае $O(|G||M|)$) вычисления оператора замыкания $(\cdot)''$. Алгоритм 2 является улучшенной версией алгоритма 1 и использует свойство антимонотонности оператора $(.)'$ для оптимизации.

Утверждение 3. *Выходы алгоритмов 1 и 2 равны.*

Алгоритм 1. Алгоритм поиска бикластеров.

Вход: $K = (G, M, I)$ – формальный контекст;
$\rho_{\min}$ – порог на значение плотности бикластера;
Выход: $B = \{(A_k, B_k) \mid (A_k, B_k) - \text{бикластер}\}$.

1: $Obj = \varnothing$; $Attr = \varnothing$; $B = \varnothing$;
2: **для всех** $g \in G$
3: $Obj.Add((g'', g'))$;
4: **для всех** $m \in M$
5: $Attr.Add((m', m''))$;
6: **для всех** $(A, B) \in Attr$
7: **для всех** $(C, D) \in Obj$
8: **если** $C \subseteq A$ и $\rho(A, D) \geqslant \rho_{\min}$ **то**
9: $B.Add((A, D))$;

При достаточно больших значениях $\rho_{\min}$ не все формальные понятия могут оказаться вложенными в некоторый бикластер, построенный по формальному контексту $\mathbb{K} = (G, M, I)$.

Утверждение 4. *Для некоторого $\rho_{\min} > 0$ существует $\mathbb{K} = (G, M, I)$ такой, что для некоторого формального понятия $(A_c, B_c) \in \mathfrak{B}(G, M, I)$ верно, что не существует $(A_b, B_b) \in \mathbf{B}$ такого, что $(A_c, B_c) \sqsubseteq (A_b, B_b)$.*

Оценим теоретически ресурсную временную и емкостную сложность алгоритмов 1 и 2:

Как уже отмечалось, вычисление операции замыкания занимает время $O(|G||M|)$, поэтому в циклах 2–3 и 4–5 алгоритма 1 эта величина умножается на число итераций циклов, т. е. на число объектов и признаков соответственно. Модифицированная версия алгоритма избавлена от такого дорогостоящего вычисления, для каждого объекта (признака). В каждой итерации циклов 2–3 и 4–5 алгоритма 2 вычисляются только содержание для объектов и объем для признаков соответственно, поэтому временная сложность каждого из этих циклов равна $O(|G||M|)$. Следует отдельно рассмотреть вычисления в цикле 6–9: т. к. при значении минимального порога плотности $\rho = 0$ проверку выполнять не стоит, то фактически необходимо только «склеить» пары объектных и признаковых понятий в согласии с определением 4. Для наивной версии ал-

Таблица 1. Теоретическая временная сложность основных блоков алгоритмов бикластеризации.

Шаги алгоритма	Алгоритм 1	Алгоритм 2
цикл 2 – 3: порождение объектных понятий	$O(\|G\|^2\|M\|)$	$O(\|G\|\|M\|)$
цикл 4 – 5: порождение признаковых понятий	$O(\|G\|\|M\|^2)$	$O(\|G\|\|M\|)$
цикл 6 – 9: построение бикластеров ($\rho_{\min} = 0$)	$O(\|G\|\|M\|^2)$	$O(\|I\|)$
цикл 6 – 9: построение бикластеров($\rho_{\min} > 0$)	$O(\|G\|^2\|M\|^2)$	$O(\|I\|\|G\|\|M\|)$

Алгоритм 2. Улучшенный алгоритм поиска бикластеров.

Вход: $K = (G, M, I)$ – формальный контекст;
$\rho_{\min}$ – порог на значение плотности бикластера;
Выход: $B = \{(A_k, B_k) \mid (A_k, B_k) - \text{бикластер}\}$.

1: $Obj.Size = |G|$; $Attr.Size = |M|$; $B = \varnothing$;
2: **для всех** $g \in G$
3: $Obj[g] = g'$;
4: **для всех** $m \in M$
5: $Attr[m] = m'$;
6: **для** $g = 1, \ldots, |G|$
7: **для всех** $m \in Obj[g]$
8: **если** $\rho\big(Attr[m], Obj[g]\big) \geqslant \rho_{\min}$ **то**
9: $B.Add\big((Attr[m], Obj[g])\big)$;

горитма это потребует времени $O(|G|^2|M|)$, а для улучшенной $O(|I|)$, т. к. факт вложения проверять явно не нужно. В случае проверки ограничения, наложенного на значение плотности бикластера, ее вычисление займет $O(|G||M|)$, что увеличит оценку времени выполнения цикла 6–9 до $O(|G|^2|M|^2)$ в первом и до $O(|I||G||M|)$ во втором алгоритмах.

Оценим нижнюю и верхнюю границы размера выхода алгоритма для случая, когда все объектные и признаковые формальные понятия участвуют в формировании бикластеров, т. е. $\rho = 0$. Получим соотношение $1 \leqslant |\mathcal{B}| \leqslant |I|$. Число бикластеров не может быть равным нулю, потому что в формировании бикластеров для любого контекста участвуют хотя бы одно признаковое и одно объектное понятия, которые вкладываются друг в друга. Очевидно, что количество бикластеров не может быть больше числа пар, принадлежащих отношению I. Такие оценки сложности вычислений и размера выхода, а также возможность «сохранения» формальных понятий в множестве порожденных бикластеров при $\rho = 0$, позволяют говорить о предложенном алгоритме как о хорошей альтернативе формальным понятиям в тех случаях, когда допустимы приближенные описания извлекаемых из данных знаний.

Эмпирический анализ эффективности алгоритма

Для экспериментальной оценки эффективности предложенного алгоритма бикластерзации были запрограммированы версии алгоритма 1 и 2. В качестве языка реализации был выбран C# из среды разработки Microsoft Visual Studio 2008. Дополнительно была исследована возможность распараллеливания (масштабирования) алгоритма с помощью средств библиотеки Task Parallel Library, входящей в состав Microsoft .NET Framework 4.0.

Эксперименты были проведены на данных из UCI Machine Learning Repository и на массиве дан-

Таблица 2. Описание наборов данных.

Набор данных	$\lvert G\rvert\times\lvert M\rvert$ ×	$\lvert I\rvert$	Плотность	$\lvert\mathfrak{B}(G,M,I)\rvert$
advertising	2000×3000	92 345	0,015	8 950 740
breast-cancer	286×43	2851	0,232	9918
flare	1389×49	18057	0,265	28742
postoperative	90×26	807	0,345	2378
SPECT	267×23	2042	0,333	21550
vote	435×18	3856	0,492	10644
zoo	101×28	862	0,305	379

Таблица 3. Зависимость количества бикластеров от величины $\rho_{\min}$.

Название	advertising	breast-cancer	flare	SPECT	vote	zoo
$\lvert\mathfrak{B}(G,M,I)\rvert$	8950740	9918	28742	21550	10644	379
$\rho = 0{,}0$	92345	2851	18057	807	3856	862
$\rho = 0{,}1$	89735	2851	18057	2042	3856	862
$\rho = 0{,}2$	80893	2851	18057	2042	3856	862
$\rho = 0{,}3$	65881	2849	18050	2042	3855	862
$\rho = 0{,}4$	45665	2678	17988	2029	3829	853
$\rho = 0{,}5$	25921	1908	17720	1753	3527	776
$\rho = 0{,}6$	10066	310	16459	835	2575	521
$\rho = 0{,}7$	2081	17	9353	262	1458	341
$\rho = 0{,}8$	165	2	1450	85	382	225
$\rho = 0{,}9$	3	2	293	32	33	63
$\rho = 1{,}0$	0	2	3	12	1	7

ных о покупке рекламных словосочетаний компании Yahoo. В таблице 2 приведено описание этих наборов данных, для каждого из них указано количество объектов, признаков, число пар, принадлежащих отношению I, плотность контекста и количество его формальных понятий.

Помимо производительности алгоритмов нас интересовала зависимость количества порождаемых бкиластеров от выбранного порога плотности. Результаты экспериментов приведены в таблице 3.

В шести экспериментах из семи мы наблюдаем заметно меньшее число бикластеров по сравнению с количество формальных понятий. Для седьмого эксперимента такой результат объясняется тем, что имеется большое количество объектов, содержания которых представимы в виде пересечения содержаний других объектов (операция редуцирования контекста по объектам оставляет только 59 объектов из 100).

Зависимость количества бикластеров от величины порога носит довольно плавный характер, хотя для некоторых данных UCI Machine Learning Repository это количество остается постоянным при уменьшении значения порога на 0,1, начиная с 1, для нескольких первых точек.

Результаты экспериментов по оценке временной эффективности алгоритмов на самом крупном из имеющихся массивов реальных данных — advertising, говорят о том, что в среднем время работы «наивной» версии алгоритма превосходит

Таблица 4. Отношение числа порожденных понятий к количеству бикластеров.

Набор данных	Сокращение
advertising	96,9
breast-cancer	3,5
flare	1,6
postoperative	2,9
SPECT	10,6
vote	2,8
zoo	0,4

время работы оптимизированной версии на порядок, более точно в 28 раз. Параллельная версия оптимизированного алгоритма работает быстрее последовательной реализации на 45%. Между тем заметного выигрыша от применения техник параллельного программирования для случая «наивной» версии алгоритма не получено. Дополнительные эксперименты проведены на массивах данных из репозитория UCI, результаты носят аналогичный характер.

В качестве направлений дальнейших исследований можно предложить разработку жадных версий разработанного алгоритма, например, по покрытию множества признаков M или отношения I, а также исследование их предсказательных свойств для рекомендательных систем и анализа данных генной экспрессии.

Литература

[1] *Биркгоф Г.* Теория решеток. — М.:Наука, 1989.

[2] *Besson J., Robardet C., Boulicaut J-F.* Constraint-based mining of formal concepts in transactional data // In proceedings of the 8th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2004.

[3] *Ganter B., Wille R.* Formal Concept Analysis: Mathematical Foundations // Springer, 1999.

[4] *Ignatov D. I., Kuznetsov S. O.* Concept-based Recommendations for Internet Advertisement // In proceedings of The Sixth International Conference Concept Lattices and Their Applications (CLA'08), Olomouc, Czech Republic, 2008.

[5] *Madeira S. K., Oliveira A. L.* Biclustering Algorithms for Biological Data Analysis: A Survey // IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics, VOL 1, NO. 1, pp. 24-45 January-March 2004.

[6] *Symeonidis P., Nanopoulos A., Papadopoulos A. N., Manolopoulos Y.* Nearest-biclusters collaborative filtering based on constant and coherent values // Inf. Retr. 11(1): 51–75 (2008).

[7] *Wille R.* Restructuring Lattice Theory: an Approach Based on Hierarchies of Concepts // Ordered Sets / Ed. by I. Rival. — Dordrecht; Boston: Reidel, 1982.— P. 445–470.

Метод иерархической аппроксимации как решение задачи многомерных косвенных измерений*

Копенков В. Н., Сергеев В. В., Тимбай Е. И.
vkop@smr.ru, vserg@smr.ru
Самара, ИСОИ РАН

В работе рассматривается метод решения задачи косвенных измерений, основанный на иерархической аппроксимации прямых и обратных функций, связывающих измеряемые величины с искомыми параметрами исследуемых объектов. Особенностью задачи является то, что вид функций заранее неизвестен и определяется по набору значений, заданных на «обучающем» конечном множестве аргументов. Результаты применения метода сравниваются с нейросетевым решением той же задачи.

Investigation of the regression reconstruction methods used for the solution of multivariate indirect measurements task*

Kopenkov V. N., Sergeev V. V., Timbai E. I.
IPSI RAS, Samara, Russia

A method for indirect measurements problem solution is considered in the work. It is based on hierarchical approximation of direct and inverse functions, which relate measured values with required parameters of objects under investigation. Particularity of the described task is that a type of functions is unknown in advance and is determined by a set of values specified by a "teaching" finite set of arguments. Results of method application are compared with the solution of the same task with the help of neural network.

В информационно-измерительной технике часто возникает ситуация, когда измеряемые параметры физического объекта доступны наблюдению только в виде некоторого набора функций этих параметров. Соответственно, решение задачи многомерных косвенных измерений состоит в переходе от измеряемого вектора функций к вектору их аргументов.

Одной из конкретных прикладных задач такого плана является задача определения относительной концентрации компонентов газовой смеси, либо состава жидкости, основанного на использовании «хемосенсоров», т. е. датчиков, интегрально чувствительных к составу смеси [1].

Если вид функций является априори неизвестным, такая задача обычно решается нейросетевыми методами. При этом этапу собственно измерений предшествует трудоемкий этап настройки нейронной сети, для которого необходимо иметь большой объем обучающих (калибровочных) экспериментальных данных. Настроенная нейронная связь, как правило, обеспечивает решение рассматриваемой задачи с точностью, достаточной для практики, однако имеет слишком высокую вычислительную сложность, препятствующую созданию простых измерительных приборов.

В данной работе рассматривается альтернативный метод решения задачи, позволяющий существенно снизить вычислительную сложность решения задачи многомерных косвенных измерений при сохранении или даже повышении точности решения.

Постановка задачи

Пусть исследуемый физический объект характеризуется вектором своих параметров:

$$(x_1, x_2, \ldots, x_M), \tag{1}$$

где M — размерность вектора. Эти параметры недоступны непосредственному наблюдению, вместо них измерительные приборы (датчики) регистрируют значения некоторых их функций — «дескрипторов»:

$$\bigl\{f_n(x_1, x_2, \ldots, x_M)\bigr\}_{n=1}^{N}, \tag{2}$$

где N — число дескрипторов. Вид функций-дескрипторов априори неизвестен, но предполагается, что они являются, во-первых, детерминированными (не меняются во времени) и, во-вторых, непрерывными и гладкими, желательно (хотя и необязательно) — монотонно изменяющимися по каждому аргументу.

Задача состоит в восстановлении регрессии [2, 3] и получении функций, по которым возможна оценка параметров (1) по результатам их «косвенных измерений» через значения дескрипторов (2). Ее решение сводится к синтезу и последующему использованию набора функций, обратных функциям (2):

$$\bigl\{x_m(f_1, f_2, \ldots, f_N)\bigr\}_{m=1}^{M}. \tag{3}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Фундаментальные проблемы информатики и информационных технологий», проект 2.12.

В общем случае данная задача синтеза функций (3) является некорректной, а ее решение, если оно существует, оказывается неустойчивым. Однако с учетом сделанных предположений о гладкости функций-дескрипторов, как правило, удается найти приближенное решение, обладающее точностью, вполне удовлетворяющей потребностям практики.

Аппроксимирующие функции для (3) могут быть найдены в результате настройки (обучения, калибровки) процедуры измерений [2, 3]. Исходными данными для такой аппроксимации являются предварительно измеренные значения функций (2) для некоторого конечного множества известных (заданных) их аргументов:

$$\left\{\left\{f_n(x_1^{(j)}, x_2^{(j)}, \ldots, x_M^{(j)})\right\}_{n=1}^{N}\right\}_{j=1}^{J}, \qquad (4)$$

где J — число наборов аргументов ($J \gg M, N$). Эти калибровочные данные удобно организовать в виде таблицы:

Таблица 1.

Аргументы				Функции			
$x_1^{(1)}$	$x_2^{(1)}$	$\cdots$	$x_M^{(1)}$	$f_1^{(1)}$	$f_2^{(1)}$	$\cdots$	$f_N^{(1)}$
$x_1^{(2)}$	$x_2^{(2)}$	$\cdots$	$x_M^{(2)}$	$f_1^{(2)}$	$f_2^{(2)}$	$\cdots$	$f_N^{(2)}$
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
$x_1^{(J)}$	$x_2^{(J)}$	$\cdots$	$x_M^{(J)}$	$f_1^{(J)}$	$f_2^{(J)}$	$\cdots$	$f_N^{(J)}$

Известное решение

Наиболее известным решением подобных задач является использование нейронных сетей [1, 2]. Нейронная сеть выбранной структуры заранее «обучается» по калибровочным данным так, что затем напрямую формируют оценки искомых параметров (1) по наблюдаемым значениям дескрипторов (2). Однако нейросетевой метод решения задачи обладает рядом недостатков, к которым, в частности, относятся:

— длительное время обучения, представляющего собой медленно сходящийся итерационный процесс;
— необходимость использования большого объема калибровочных данных для обучения, вызванная тем, что аппроксимируемые обратные функции (3) не являются гарантированно гладкими и простыми;
— сложность оптимизации, необходимость многократного переобучения сети при поиске подмножества наиболее эффективных дескрипторов;
— слабая устойчивость получаемых решений при зашумлении входной измерительной информации.

Предлагаемое решение

Мы предлагаем вместо нейронных сетей использовать метод иерархической аппроксимации [4, 5],

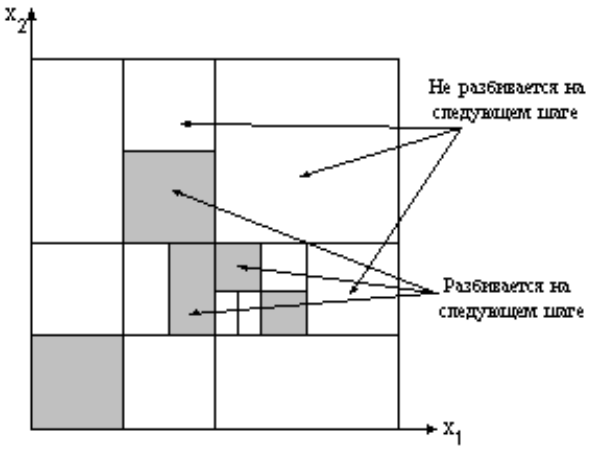


Рис. 1. Разбиение области определения функции.

в котором приближение многомерной функции, формируемое по набору ее дискретных значений, представляется структурой данных в виде дерева. Причем, будем использовать этот метод дважды, т. е. строить решение поставленной задачи в два шага.

На первом шаге проводим аппроксимацию каждой функции вида (2). Область определения дескриптора, представляющая собой M-мерный гиперкуб, последовательно разбивается по осям и порождает древовидную структуру данных (см. «двумерную» иллюстрацию на Рис. 1). Эта структура формируется последовательно, каждый шаг разбиения включает следующие этапы:

— оценку перспективности разбиения каждой области путем вычисления в них ошибки аппроксимации;
— нахождение аргумента, по которому разбиение области дает максимальное уменьшение общей ошибки;
— собственно разбиение области (образование пары новых терминальных вершин дерева), для каждой из областей, отмеченных для разбиения;
— синтез функции аппроксимации и вычисление ошибки в новых вершинах, а так же уточнение общей ошибки аппроксимации требуемой функции.

Во всех терминальных вершинах дерева использовалась локальная линейная аппроксимация, поэтому для них должны быть вычислены (и запомнены) коэффициенты линейных функций, минимизирующих ошибки аппроксимации. Коэффициенты рассчитываются по МНК, решением СЛАУ в каждой терминальной вершине, либо «спуском» коэффициентов из вышестоящей вершины, в случае недостаточности точек для решения СЛАУ. Притом это можно сделать за один проход по обучающей выборке.

Разбиение признакового пространства выполнялось методом разбиения узлов древовидного классификатора с большой погрешностью пополам, с разбиением либо по очередному признаку, либо с выбором признака, вносящего наибольший вклад в погрешность.

Более сложным вариантом является поиск оптимального порога разбиения для каждого признака и терминальной вершины. Данный подход увеличивает время построения классификатора, а также объем памяти, при незначительном повышении качества аппроксимации. Кроме того, в случае разбиения узлов в середине диапазона значений необходимо лишь сделать несколько дополнительных итераций ветвления для достижения аналогичной точности.

Остановка процесса ветвления — при ограниченном объеме имеющихся данных нельзя неограниченно увеличивать сложность аппроксимирующей функции. Иначе решающее правило «максимально адаптируется» к обучающей выборке и будет демонстрировать неудовлетворительные результаты на контрольных векторах признаков. В качестве параметра остановки процесса были исследованы различные критерии: достижение требуемой точности аппроксимации; достижение заданной максимальной/средней глубины дерева; получение заданного количества узлов дерева; совершение заданного количества шагов разбиения и т. д.

Поскольку дескрипторы заведомо имеют простую (гладкую) форму, для их хорошего аппроксимационного описания достаточно использовать небольшой объем калибровочных данных [1, 3, 6].

На втором шаге аналогичным способом выполняется иерархическая аппроксимация самих функций (3), описывающих искомые параметры.

Заметим, что после первого шага мы имеем аппроксимационные описания дескрипторов, заданные для *любых* значений аргументов в области определения, следовательно, можем рассчитать по ним любой дополнительный объем калибровочных данных, т. е. существенно дополнить таблицу 1 и получить очень хорошую аппроксимацию решающих функций, не опираясь на допущение об их гладкости.

Постановка экспериментов

Для исследования эффективности рассматриваемых методов был проведен ряд вычислительных экспериментов. Моделировалось решение задачи определения относительной концентрации компонентов газовой смеси, основанного на использовании небольшого набора «хемосенсоров». Рассматривались четырехкомпонентные смеси и случай использования шести хемосенсоров ($M = 4,\ N = 6$). Измеряемыми параметрами являлись относительные концентрации газов в смеси ($0 < x_n < 1$). В качестве аналога функций-дескрипторов использовались многомерными полиномы второго порядка с шумом соответствующим характеристикам съемочной аппаратуры:

$$f_n(x_1, \ldots, x_4) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_4 + a_5x_1^2 + a_6x_1x_2 + a_7x_1x_3 + a_8x_1x_4 + a_9x_2^2 + a_{10}x_2x_3 + a_{11}x_2x_4 + a_{12}x_3^2 + a_{13}x_3x_4 + a_{14}x_4^2. \quad (5)$$

Для формирования калибровочных данных (таблицы 1) случайно выбирались $J = 10^4$ наборов аргументов и вычислялись соответствующие им значения дескрипторов. Для имитации ошибок реальных измерений ко всем вычисленным значениям дескрипторов добавлялся случайный шум, имеющий нулевое математическое ожидание и среднеквадратичное отклонение, равное 7% от диапазона значений соответствующего дескриптора.

Результаты экспериментов для предлагаемого метода

В таблицах 2 и 3 приведены относительные (в % от диапазона функций) СКО аппроксимации, выполняемой на 1-ом и 2-ом шагах решения задачи соответственно, для условий эксперимента, описанных в предыдущем пункте.

Таблица 2.

f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6
3,91	3,88	3,90	3,90	3,95	3,92

Таблица 3.

x_1	x_2	x_3	x_4
0,026	0,047	0,034	0,046

Заметим, что во всех экспериментах глубина дерева не превышала 10, поэтому калибровка и применение процедуры оценивания не требовали большого объема вычислений (см. п. 7).

Результаты экспериментов для нейронной сети

Для экспериментов была взята нейронная сеть с N входами, одним скрытым слоем (L нейронов в скрытом слое) и одним выходом. Для обучения сети использовался известный алгоритм обратного распространения ошибки («back propagation»). Рассматривались активационные функции: функция Ферми, гиперболический тангенс, дробно-рациональная и линейная функции.

В экспериментах варьировались: число нейронов в скрытом слое ($5 \leqslant L \leqslant 50$), активационные функции, параметры алгоритма обучения, и число итераций ($100 \leqslant I \leqslant 10\,000$).

Результаты, с минимальным СКО аппроксимации параметров смеси, представлены в таблице 4.

Таблица 4.

x_1	x_2	x_3	x_4
0,038	0,062	0,041	0,060

Как видно из таблиц 3 и 4, аппроксимационная оценка набора значений аргументов по известным наборам дискретных значений откликов функции обоими методами выполняется с достаточной точностью и СКО оценивания менее 5%.

Сравнение вычислительной эффективности методов

В продолжение сравнения методов была проведена теоретическая и экспериментальная оценка их вычислительной сложности — необходимого числа арифметических операций при обучении и применении процедур аппроксимации.

Обучение нейронной сети требует количества операций сложения/умножения, пропорционального числу выполняемых итераций (I), объему таблицы (числу векторов) калибровочных данных (J) и числу нейронов (L) в скрытом слое. В нашем случае (при фиксированных остальных параметрах сети) оно описывается формулой:

$$U_{\text{network}}^{\text{study}} = 170 \cdot I \cdot J \cdot L. \qquad (6)$$

При $J = 10^4$ (см. п. 3) и значениях $L = 10,\ I = 1000$ из (6) получаем: $U_{\text{network}}^{\text{study}} = 17 \cdot 10^9$.

Применение нейронной сети для оценки 4 параметров по 6 значениям дескрипторов требует $U_{\text{network}}^{\text{use}} = 60L$ арифметических операций на измерение. При $L = 10$ получаем: $U_{\text{network}}^{\text{use}} = 600$.

Обучение процедуры иерархической аппроксимации требует выполнения

$$U_{\text{tree}}^{\text{study}} = 1200 \cdot K \cdot (J + J_2) + 2\,000 \cdot 2^{K-1} \qquad (7)$$

операций, где K — глубина (число иерархических уровней) аппроксимирующего дерева, J_2 — объем «расширенной» таблицы калибровочных данных (см. п. 2), используемой при обучении аппроксиматоров второго этапа. При $K = 10,\ J = 10^4$, $J_2 = 10^5$, из (7) получаем: $U_{\text{tree}}^{\text{study}} = 13 \cdot 10^7$ операций, что примерно в 130 раз меньше, чем при обучении нейронной сети.

Применение иерархической аппроксимации для оценки четырех параметров по шести дескрипторам требует выполнения

$$U_{\text{tree}}^{\text{use}} = 4 \cdot (K + 11)$$

арифметических операций. Для $K = 10$ имеем: $U_{\text{tree}}^{\text{study}} = 84$, что примерно в 7 раз меньше, чем вычислительная сложность нейросетевого метода.

В ходе программной реализации и вычислительных экспериментов представленных методов теоретические оценки скорости обучения/построения и применения классификаторов были полностью подтверждены (программная реализация методов проводилась в одной среде разработки — C++, с использованием однотипных компонент и функций, все тесты и исследования проводились на одной и той же аппаратной платформе).

Выводы

Таким образом, предложенный метод позволяет эффективно решать поставленную задачу многомерных косвенных измерений с аналогичной точностью на классе рассматриваемых функций, но с существенно меньшими вычислительными затратами, чем известный нейросетевой метод.

Литература

[1] *Raimundo I. M., Narayanaswamy R.* Simultaneous determination of relative humidity and ammonia in air employing an optical fibre sensor and artificial neural network // Sensors and Actuators. — 2001. — B 74. — Pp. 60–68.

[2] Computer Image Processing, Part I: Basic concepts and theory. Edited by *Soifer V. A.* — VDM Verlag, 2009. — 256 p.

[3] *Вапник В. Н.* Восстановление зависимостей по эмпирическим данным. — М.: Наука, 1979. — 387 с.

[4] *Сергеев В. В., Копенков В. Н., Чернов А. В.* Сравнительный анализ методов нейронных сетей и иерархической аппроксимации в задачах фильтрации Изображений // Автометрия. — 2006. — № 42. — С. 100–106.

[5] *Sergeev V. V., Kopenkov V. N., Chernov A. V.* Comparison of the function approximation methods applied to image processing // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2007. — Vol. 17, No. 2. — Pp. 217–221.

[6] *Kopenkov V. N., Chernov A. V.* Parametric Optimization of Families of Features in Image Reconstruction Methods Based on the Principles of Pattern Recognition Theory // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2003. — Vol. 13, No. 1. — Pp. 80–81.

Байесовский подход к задаче обучения распознаванию образов в нестационарной генеральной совокупности*

Красоткина О. В., Моттль В. В., Турков П. А.
krasotkina@tsu.tula.ru
Тула, Тульский государственный университет

Целью данного исследования является создание математического аппарата для решения типичных для практики задач обучения распознаванию образов в генеральных совокупностях, свойства которых изменяются во времени. Критерий обучения распознаванию образов в условиях нестационарности свойств генеральной совокупности сформулирован как обобщение критерия опорных векторов. Предложенный численный алгоритм обучения имеет линейную вычислительную сложность относительно длины обучающего временного ряда.

Baesian approach to the pattern recognition problem in nonstationary environment*

Krasotkina O. V., Mottla V. V., Turkov P. A.
Tula State University, Tula, Russia

The classical learning problem of pattern recognition in a finite-dimensional linear space of real-valued features is studied under the conditions of a non-stationary universe. The training criterion of non-stationary pattern recognition is formulated as a generalization of the classical Support Vector Machine. The respective numerical algorithm has the computation complexity proportional to the length of the training time series.

Большинство современных методов распознавания образов работают в молчаливом предположении, что свойства генеральной совокупности, а как следствие и искомое решающее правило, остаются одними и теми же и в процессе сбора обучающей выборки и в момент экзамена. Однако, в последнее время появилось довольно большое число приложений, в которых объекты обучающей совокупности поступают на вход системы на протяжении длительного промежутка времени, в течении которого свойства анализируемого явления могут существенным образом изменяться. Примером такой задачи может служить задача фильтрации нерелевантных или рекламных ссылок в результате поискового запроса. В этой задаче поведение распространителей рекламы постоянно совершенствуется, что приводит к изменению признаковых описаний рекламных ссылок, что естественно должно приводить к адекватной корректировке механизма поиска. Часто в задачах подобного рода природа изменений в генеральной совокупности, как и сам факт изменений оказываются скрытыми от непосредственного наблюдения, что еще больше затрудняет задачу обучения. Подобная проблема в литературе известна под названием *смещения решающего правила (concept drift)* [1].

В настоящее время в литературе известны три подхода к построению алгоритмов, учитывающих нестационарный характер решающего правила: алгоритмы, основанные на отборе объектов, алгоритмы основанные на взвешивании объектов и алгоритмы, основанные на слиянии и отборе классификаторов. Целью алгоритмов, использующих отбор объектов является селекция прототипов, релевантных для решающего правила в данный момент времени. Как правило, это реализуется с помощью технологии скользящего окна, когда решающее правило в данный момент времени строится только на основании объектов, полученных в моменты времени, непосредственно предшествующих данному. Примерами таких алгоритмов может являться семейство алгоритмов FLORA [1] и TMF [2].

Алгоритмы, основанные на взвешивании объектов [3], поступающих в разные моменты времени, эксплуатируют способность некоторых методов, таких как, например, метод опорных векторов, присваивать в процессе обучения веса различным объектам. Как правило, веса объектам присваиваются в зависимости от времени, прошедшего с момента поступления объектов.

При обучении распознаванию образов в нестационарных генеральных совокупностях с использованием технологии комбинирования классификаторов [6, 4] искомое решающее правило строится как голосование или взвешенное голосование классификаторов полученных для различных условий. Например, в работе [5] предлагается кластеризовать объекты обучающей совокупности и строить для каждого кластера свой классификатор. В работе [7] комбинируются различные решающие правила, полученные для групп объектов, объединенных в зависимости от их «возраста».

В общем, можно отметить, что все существующие на сегодняшний момент методы являются в той или иной степени эвристическими, причем,

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №09-01-12085, 09-07-00394.

конкретный набор эвристик определяется спецификой решаемой задачи. Кроме того, в литературе до сих пор не вводилось формальных определений понятия нестационарности решающего правила, что существенно затрудняет анализ области применимости методов. В данной работе предлагается вероятностная концепция нестационарной генеральной совокупности, основанная на байесовском подходе к задаче обучения распознаванию образов. Основное мгновенное свойство нестационарной генеральной совокупности понимается как изменяющаяся во времени разделяющая гиперплоскость, в некотором смысле наилучшим образом характеризующая различие векторов признаков объектов двух классов. Предложенная концепция приводит к алгоритму обучения, являющемуся обобщением классического метода опорных векторов на случай, когда параметры искомой разделяющей гиперплоскости меняются во времени. Алгоритм обучения, представленный в работе, обладает линейной вычислительной сложностью относительно длины обучающего временного ряда.

Байесовская постановка задачи обучения распознаванию образов в нестационарной генеральной совокупности

Пусть каждый объект генеральной совокупности $\omega \in \Omega$ представлен точкой в линейном пространстве признаков $\boldsymbol{x}(\omega) = \big(x^1(\omega), \ldots, x^n(\omega)\big) \in \in \mathbb{R}^n$, а его скрытая фактическая принадлежность к одному из двух классов определяется значением индекса класса $y(\omega) \in \{1, -1\}$. В работе [8] предложена вероятностная модель генеральной совокупности объектов реального мира, основным элементом которой является параметрическое распределение объектов двух классов

$$\varphi\left(\boldsymbol{x} \,|\, \boldsymbol{a}, b, y; c\right) = \begin{cases} \text{const}, & yz(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{x}) \geqslant 1; \\ e^{-c(1-yz(\boldsymbol{a},\boldsymbol{x}))}, & yz\left(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{x}\right) < 1, \end{cases} \quad (1)$$

определяемое объективно существующей гиперплоскостью $z(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{a}) = \boldsymbol{a}^\intercal \boldsymbol{x} + b = 0$ с неизвестным направляющим вектором признаков $\boldsymbol{a} = = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$, имеющим априорное распределение $\Psi(\boldsymbol{a}, b \,|\, \sigma^2) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\boldsymbol{a}^\intercal \boldsymbol{a}\right)$. Применение принципа максимума апостериорной вероятности для оценивания параметров $(\boldsymbol{a}, b)$ направляющего вектора при таких предположениях приводит к широко известному критерию опорных векторов

$$\begin{cases} J(\boldsymbol{a}, b, \delta_1, \ldots, \delta_N \,|\, c) = \boldsymbol{a}^\intercal \boldsymbol{a} + c \sum\limits_{j=1}^{N} \delta_j \to \min; \\ y_j\left(\boldsymbol{a}^\intercal \boldsymbol{a} + b\right) \geqslant 1 - \delta_j, \quad \delta_j \geqslant 0, \quad j = 1, \ldots, N, \end{cases} \quad (2)$$

который был сформулирован В. Н. Вапником с сугубо детерминистических позиций. Естественно, что понятие времени здесь полностью отсутствует.

Принципиальное отличие предлагаемой в данной работе концепции нестационарной генеральной совокупности заключается во введении в рассмотрение фактора времени t. Предполагается, что основное свойство нестационарной генеральной совокупности выражается изменяющейся во времени разделяющей гиперплоскостью, характеризующей преимущественное различие векторов признаков объектов двух классов и, в свою очередь, полностью определяемой своим направляющим вектором и параметром положения, которые должны рассматриваться как функции времени $\boldsymbol{a}_t$ и b_t: $f_t\big(\boldsymbol{x}(\omega)\big) = \boldsymbol{a}_t^\intercal \boldsymbol{x} + b_t$. В терминах несобственных распределений вероятностей двух классов в пространстве признаков такое представление о генеральной совокупности выражается в виде предположения, что параметры этой пары распределений изменяются во времени:

$$\varphi\left(\boldsymbol{x} \,|\, \boldsymbol{a}_t, b_t, y; c\right) = \begin{cases} \text{const}, & yz(\boldsymbol{a}_t, \boldsymbol{x}) \geqslant 1; \\ e^{-c(1-yz(\boldsymbol{a}_t,\boldsymbol{x}))}, & yz(\boldsymbol{a}_t, \boldsymbol{x}) < 1, \end{cases} \quad (3)$$

где $z(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{a}_t) = \boldsymbol{a}_t^\intercal \boldsymbol{x} + b = 0$.

Будем полагать, что в нулевой момент времени априорное распределение параметров разделяющей гиперплоскости является несобственным и имеет вид: $\psi_0(\boldsymbol{a}_0, b_0) \propto \psi_0(\boldsymbol{a}_0) = \mathcal{N}(\boldsymbol{a}_0 \,|\, \boldsymbol{0}, \boldsymbol{I})$. В свою очередь, направляющий вектор $\boldsymbol{a}_j$ будем рассматривать как случайный стационарный процесс: $\boldsymbol{a}_t = q\boldsymbol{a}_{t-1} + \boldsymbol{\xi}_t$, $\mathsf{E}\left(\boldsymbol{\xi}_t\right) = \boldsymbol{0}$, $\mathsf{E}(\boldsymbol{\xi}_t \boldsymbol{\xi}_t^\intercal) = d\,\boldsymbol{I}$, $0 \leqslant q < 1$.

Теперь всякий объект $\omega \in \Omega$ рассматривается всегда только вместе с указанием момента времени, в который он предъявлен (ω, t). В результате обучающая совокупность приобретает структуру множества троек $\big\{(X_t \in \mathbb{R}^n,\ Y_t,\ t)\big\}_{t=1}^{T}$, где $(X_t, Y_t) = = \big\{(\boldsymbol{x}_{k,t}, y_{k,t})\big\}_{k=1}^{N_t}$ — подвыборка объектов, поступившая в момент времени t. Естественно нумеровать подвыборки объектов обучающей совокупности в порядке их поступления, тогда уместно говорить скорее об обучающей последовательности, нежели об обучающей совокупности, рассматривая ее как временной ряд.

В динамической постановке задача обучения превращается в задачу анализа двухкомпонентного временного ряда, в котором требуется, анализируя наблюдаемую компоненту (X_t, y_t), дать оценку скрытой компоненты $(\boldsymbol{a}_t, b_t)$. Это стандартная задача анализа сигналов (временных рядов), специфика которой заключается лишь в предполагаемой модели связи между скрытой и наблюдаемой компонентами. Согласно классификации задач оценивания скрытой компоненты сигнала, введенной Н. Винером [9], естественно различать, по крайнем мере, два вида задач обучения.

Задача фильтрации обучающей последовательности. В этой задаче требуется непосредственно

в процессе наблюдения давать оценку параметров разделяющей гиперплоскости $(\hat{\boldsymbol{a}}_t, \hat{b}_t)$ в текущий момент времени t на основании векторов признаков и классов объектов, поступивших в предыдущие моменты времени до текущего момента t включительно. *Задача интерполяции.* Здесь требуется оценить изменяющиеся параметры разделяющей гиперплоскости $(\hat{\boldsymbol{a}}_t, \hat{b}_t)$ в момент времени t на основании объектов, поступивших на всем интервале наблюдения $\{(\hat{\boldsymbol{a}}_j, \hat{b}_j)\}_{j=1}^N$. С формальной точки зрения оценка параметров разделяющей гиперплоскости в последний момент интервала наблюдения $(\hat{\boldsymbol{a}}_N, \hat{b}_N)$, полученная при решении задачи интерполяции, является решением задачи фильтрации для этого момента. Однако смысл задачи фильтрации заключается в том, чтобы очередные оценки вычислялись непосредственно в процессе поступления новых наблюдений, без решения всякий раз задачи интерполяции для временного ряда возрастающей длины.

Применение принципа максимизации апостериорной вероятности для оценивания последовательности параметров $(\boldsymbol{a}_t, b_t)_{t=1}^T$ при принятых предположениях об априорных плотностях параметров направляющего вектора и плотностях классов приводит к следующему оптимизационному критерию

$$\begin{cases} J(\boldsymbol{a}_t, b_t, \delta_{t,j}, t = 0, \ldots, T) = \boldsymbol{a}_0^\intercal \boldsymbol{a}_0 + \\ \quad + \frac{1}{d} \sum\limits_{t=1}^{T} (\boldsymbol{a}_t - q\boldsymbol{a}_{t-1})^\intercal (\boldsymbol{a}_t - q\boldsymbol{a}_{t-1}) + \\ + \frac{1}{d'} \sum\limits_{t=1}^{T} (b_t - b_{t-1})^2 + \sum\limits_{t=1}^{T} \sum\limits_{j=1}^{N_t} \delta_{j,t} \to \min\limits_{[\boldsymbol{a}_t, b_t]_{t=1}^T}; \\ y_{j,t}(\boldsymbol{a}_t^\intercal \boldsymbol{x}_{j,t} + b_t) \geqslant 1 - \delta_{j,t}, \quad \delta_{j,t} \geqslant 0, \\ \quad j = 1, \ldots, N_t, \quad t = 1, \ldots, T \end{cases} \tag{4}$$

Критерий (4) реализует концепцию оптимальной достаточно гладкой последовательности разделяющих гиперплоскостей в отличие от концепции единственной оптимальной гиперплоскости в (2).

Как и классическая задача обучения, динамическая задача (4) является задачей квадратичного программирования, но содержит $T(n+1)+N$ переменных, в отличие от $(n+1)+N$ переменных в (2). Известно, что вычислительная сложность задачи квадратичного программирования общего вида пропорциональна кубу числа переменных, т. е. динамическая задача, на первый взгляд, существенно сложнее классической.

Однако целевая функция в динамической задаче является парносепарабельной, т. е. представляя собой сумму частных функций, каждая из которых зависит от переменных, связанных только с одним либо двумя моментами времени в порядке их возрастания. В работе [10] был предложен асимптотически точный алгоритм решения задачи парносепарабельного квадратичного программирования (4) в режиме интерполяции, вычислительная сложность которого линейна относительно длины временного ряда T. Однако этот алгоритм оказывается неэффективным в случае, если задача динамического распознавания образов сформулирована как задача фильтрации обучающей последовательности. Если в момент времени T уже было построено решающее правило, тогда при поступлении подвыборки объектов в момент времени $T+1$ для определения параметров направляющего вектора разделяющей гиперплоскости $\boldsymbol{a}_{T+1}$ и b_{T+1} придется решать полную задачу парносепарбельного квадратичного программирования (4), заново обучаясь на всех объектах, пришедших от 1 до $T+1$ момента включительно. При этом совершенно ясно, что общая сложность задачи фильтрации будет пропорциональна квадрату числа моментов времени. Кроме того, степень временной изменчивости искомого решающего правила определяется параметрами d и d'. Выбрать эти параметры априори представляется невозможным и для их оценки приходится использовать процедуру скользящего контроля, т. е. многократно решать исходную задачу попеременно выбрасывая одно из наблюдений. При использовании асимптотически точного алгоритма оптимизации критерия (4) объем вычислений процедуры скользящего контроля оказывается пропорциональным квадрату длины обучающей последовательности. В данной работе предлагается другой алгоритм оптимизации парно-сепарабельного критерия (4), являющийся приближенной реализацией процедуры динамического программирования и позволяющий решать означенные выше задачи за число итераций, пропорциональное длине обучающей последовательности.

Алгоритм обучения распознаванию образов в режиме фильтрации обучающей последовательности

В основе предлагаемого алгоритма лежит идея использования для оптимизации получившегося парно-сепарбельного критерия общего принципа динамического программирования. Введем новые обозначения $\boldsymbol{z}_t = [\boldsymbol{z}_t'^\intercal z_t'']^\intercal$, $\boldsymbol{z}_t' = [\boldsymbol{a}_t^\intercal \; b_t]^\intercal$, $\boldsymbol{z}_t'' = [\delta_j]_{j=1}^{N_t}$,

$$\zeta_t(\boldsymbol{z}_t') = (\boldsymbol{z}_t' - \boldsymbol{z}_t^0)^\intercal \boldsymbol{Q}_t^0 (\boldsymbol{z}_t' - \boldsymbol{z}_t^0),$$

$$\chi_t(\boldsymbol{z}_t'') = C\boldsymbol{e}_t^\intercal \boldsymbol{z}_t'', \quad \boldsymbol{e}_t = [1]_1^{N_t}, \quad t = 1, \ldots, T,$$

$$\gamma_t(\boldsymbol{z}_{t-1}', \boldsymbol{z}_t') = (\boldsymbol{z}_t' - \boldsymbol{A}_j \boldsymbol{z}_{t-1}')^\intercal \boldsymbol{U}_j (\boldsymbol{z}_t' - \boldsymbol{A}_j \boldsymbol{z}_{t-1}')$$

и перепишем критерий (4) в более удобном виде

$$J(\boldsymbol{z}_0, \ldots, \boldsymbol{z}_T) = \sum_{t=0}^{T} \zeta_t(\boldsymbol{z}_t') + \sum_{t=0}^{T} \chi(\boldsymbol{z}_t'') + \\ + \sum_{t=1}^{T} \gamma_t(\boldsymbol{z}_{t-1}', \boldsymbol{z}_t') \to \min, \quad \boldsymbol{z}_t \in Z_t,$$

где области допустимых значений переменных определяются условиями

$$\big\{\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^{n+2}\colon \boldsymbol{g}_j^{\intercal}\cdot\boldsymbol{z}'_t+z''_j-1\geqslant 0,\\ j=(N_{t-1}+1),\ldots,N_t;\ t=0,\ldots,T;\ \boldsymbol{z}''_t\geqslant 0\big\}.$$

Центральная идея метода динамического программирования заключается в понятии последовательности функций Беллмана $\tilde{J}_t(\boldsymbol{z}_t)=\min\limits_{\boldsymbol{z}_0,\ldots,\boldsymbol{z}_{t-1}} J_t\big([\boldsymbol{z}_s]_{s=1}^{t}\big)$, $[\boldsymbol{z}_s\in Z_s]_{s=0}^{t-1}$, связанных с частичными критериями

$$J_t(\boldsymbol{z}_0,\ldots,\boldsymbol{z}_t)=\\ =\sum_{s=0}^{t}\zeta_s(\boldsymbol{z}'_s)+\sum_{s=0}^{t}\chi(\boldsymbol{z}_s)+\sum_{s=1}^{t}\gamma_s(\boldsymbol{z'}_{s-1},\boldsymbol{z}_s{}'),$$

имеющими такую же структуру, как и полная целевая функция, но определенными на множестве переменных $Z_t=(\boldsymbol{z}_s,\ s=0,\ldots,t)$. Для получения фильтрационных оценок параметров разделяющей гиперплоскости мы будем использовать фундаментальное свойство функции Беллмана

$$\tilde{J}_t(\boldsymbol{z_t})=\zeta_t(\boldsymbol{z}_t{}')+\chi(\boldsymbol{z}_t{}'')+\\ +\min_{\boldsymbol{z}'_{t-1},\boldsymbol{z}''_{t-1}}\big[\gamma_t(\boldsymbol{z}'_{t-1},\boldsymbol{z}_t{}')+\tilde{J}_{t-1}(\boldsymbol{z}_{t-1})\big],\quad(5)$$

которое называется прямым рекуррентным соотношением. Процедура начинается со значения первой функции Беллмана $\tilde{J}_0(\boldsymbol{z}_0)=\zeta_0(\boldsymbol{z}_0{}')+\chi(\boldsymbol{z}_0{}'')$. Затем функции Беллмана рекуррентно пересчитываются для последующих отсчетов, в соответствии с прямым рекуррентным соотношением. При этом минимум функции Беллмана на каждом шаге определяет фильтрационное значение параметров оптимальной разделяющей гиперплоскости

$$\hat{\boldsymbol{z}}_t=\arg\min_{\boldsymbol{z}_t}\hat{J}_t(\boldsymbol{z}_t),\quad \boldsymbol{z}_t\in Z_t.\qquad(6)$$

В основе процедуры оптимизации лежит предположение, что существуют, подходящая компактная форма представления функций Беллмана, позволяющая хранить эти функции в памяти. В нашем случае предыдущая функция Беллмана в (5) является кусочно-квадратичной. При этом дробность кусочной квадратичности функций Беллмана будет нарастать на каждом шаге процедуры динамического программирования, что означает невозможность подобрать для них адекватное конечнопараметрическое семейство. Это делает невозможным численную реализацию процедуры динамического программирования.

Предлагаемая здесь идея приближенной реализации процедуры динамического программирования заключается в замене функции

$$F_t(\boldsymbol{z}'_t)=\min_{\boldsymbol{z}_{t-1}\in Z_{t-1}}\big[\gamma_t(\boldsymbol{z}_{t-1}{}',\boldsymbol{z}'_t)+\tilde{J}_{t-1}(\boldsymbol{z}_{t-1})\big]$$

подходящей квадратичной функцией

$$\hat{F}_t(\boldsymbol{z}'_t)=\hat{c}_t+(\boldsymbol{z}'_t-\hat{\boldsymbol{z}}_t)^{\intercal}\hat{\boldsymbol{Q}}_t(\boldsymbol{z}'_t-\hat{\boldsymbol{z}}_t).$$

Тогда квадратичными будут и следующие аппроксимации функций Беллмана и станет возможной численная реализация процедуры динамического программирования Таким образом, квадратичная аппроксимация очередной функций Беллмана сводится к подбору подходящих значений параметров $(\hat{c}_t,\hat{\boldsymbol{z}}_t,\hat{\boldsymbol{Q}}_t)$ квадратичной функции $\hat{F}_t(\boldsymbol{z}'_t)$, которые обеспечивали бы сохранение основных особенностей, вообще говоря, неквадратичной функции и, следовательно, исходной функции Беллмана. Такими особенностями являются: положение точек минимума функции $\hat{\boldsymbol{z}}_t=\arg\min F_t(\boldsymbol{z}'_t)$, значения в точках минимума $\hat{c}_t=\min F_t(\boldsymbol{z}'_t)$, а также матрица вторых производных в точке минимума

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_t=\nabla^2F_t(\boldsymbol{z}'_t)\big|_{\arg\min F_t(\boldsymbol{z}'_t)}.$$

Экспериментальное исследование предложенного алгоритма обучения распознавания образов в нестационарных генеральных совокупностях

Объектом экспериментального исследования в данной работе явилась задача фильтрации спам-адресов в результатах поискового запроса. Поведение распространителей сетевой рекламы постоянно совершенствуется и, в результате, классификатор рекламных ссылок, используемый поисковой машиной, должен подстраиваться под поведение спамеров, и, следовательно, мы приходим к задаче построения решающего правила, изменяющегося во времени.

В качестве тестовых данных была взято анонимное множество веб-адресов URL Reputation Data Set из репозитория UCI, впервые описанное в работе [11]. Данное множество состоит из адресов веб-ресурсов за 121 день, сгруппированных по дням наблюдений и содержит как рекламные, так и релевантные ссылки. Каждый объект в базе характеризуется 3,2 млн. признаков, которые можно условно разделить на две группы: лексические (имя узла сети, первичный домен, домен верхнего уровня и т. д) и зависящие от узла сети (информация с сервиса WHOIS, признаки различных типов DNS записи, географическое положение и т. д.). Значения признаков нормализованы от 0 до 1, а сами признаки анонимны. Для проведения эксперимента из данной базы данных различным образов случайно отбирались по 10 объектов для каждого из 11 дней, взятых с 1 по 110 день с шагом в 10 дней. Контрольное множество составляли случайно отобранные 4 000 объектов 120 дня. Из признаковых описаний объектов, участвующих в эксперименте были удалены признаки, значения кото-

рых одинаковы на всех объектах обучающей совокупности, число оставшихся число признаков при этом составило 326. Эксперимент повторялся многократно для различных наборов обучающих объектов. В эксперименте сравнивались между собой два алгоритма: обычный метод опорных векторов, с гиперплоскостью, построенной по всем объектам обучающей выборки и алгоритм последовательного уточнения решающего правила, предложенный в работе. В алгоритме последовательного уточнения параметры нестационарности искомого решающего правила d и d' были подобраны с помощью процедуры скользящего контроля, на каждой итерации которой нестационарное решающее правило строилось без учета объектов, поступивших в один из дней. Для каждого алгоритма подсчитывался общий процент ошибочно классифицированных ссылок ε, процент URL сайтов злоумышленников, ошибочно отнесенные к безопасным, ε^- и процент URL безопасных сайтов, ошибочно отнесенные к зловредным ε^+. Как видно из результатов, приведенных в таблице, инкрементный алгоритм обучения распознавания образов позволяет существенно улучшить качество распознавания, что косвенно подтверждает нестационарную природу данных, использованных для экспериментов.

Алгоритм	ε^-, %	ε^+, %	ε, %
SVM	32,32	5,94	16,0
Incremental Algorithm	14,96	4,49	8,49

Выводы

В работе произведена адаптация основной постановки задачи обучения распознаванию образов с двумя классами объектов в конечномерном пространстве действительных признаков к условиям нестационарной генеральной совокупности. Разработана концепция оптимальной разделяющей гиперплоскости с учетом ее изменения во времени. Предложены две разные концепции обучения распознаванию образов в нестационарной генеральной совокупности — задача интерполяции и задача фильтрации обучающей последовательности. Предложен численный метод и алгоритм обучения в режиме фильтрации, обладающие линейной вычислительной сложностью относительно длины обучающего временного ряда.

Литература

[1] *Widmer G., Kubat M.* Learning in the presence of concept drift and hidden contexts // Machine Learning. — 1996. — Vol. 23, No. 1. — Pp. 69–101.

[2] *Salganicoff M.* Tolerating concept and sampling shift in lazy learning using prediction error context switching // AI Review, Special Issue on Lazzy Learning. — 1997. — Vol. 11, No. 1–5. — Pp. 133–155.

[3] *Klinkenberg R.* Learning drifting concepts example selection vs. example weighting // Intellegent data analysis, Special Issue on Incremental Learning Systems Capable of Dealing with Concept Drift. — 2004. — Vol. 8, No. 3. — Pp. 281–300.

[4] *Kuncheva L.* Classifier Ensembles for Changing Environments // Proc. 5-th Int. Workshop on Multiple Classfier Systems, Cagliari, Italy, Springer-Verlag, 2004. — Pp. 1–15.

[5] *Harries M., Sammut C., Horn K.* Extracting hidden context // Machine Learning. — 1998. — Vol. 32, No. 2. — Pp. 101–126

[6] *Policar R., Muhlbaier M.* An Ensemble Approach for Incremental Learning in Nonstationary Environments // MCS 2007, LNCS 4472, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. — Pp. 490-–500.

[7] *Kolter J. Z., Malof M. A.* Dynamic weighted majority: a new ensemble method for tracking concept drift. // 3rd IEEE Int. Conf. on Data Mining ICDM-2003, IEEE CS Press, 2003. — Pp. 123–130.

[8] *Татарчук А. И., Сулимова В. В., Моттль В. В., Уиндридж Д.* Метод релевантных потенциальных функций для селективного комбинирования разнородной информации при обучении распознаванию образов на основе байесовского подхода // Всеросс. конф. ММРО-14, М.:МАКС Пресс, 2009. — С. 188—191.

[9] *Wiener N.* Extrapolation, Interpolation, and Smoothing of Stationary Random Time Series with Engineering Applications. — Technology Press of MIT, John Wiley & Sons, 1949. — 163 p.

[10] *Шавловский М.Б., Красоткина О.В, Моттль В.В.* Задача обучению распознаванию образов в нестационарной генеральной совокупности // Всеросс. конф. ММРО-13, 2007. — С. 226–230

[11] *Ma J., Saul K L, Savage S, Voelker G* Identifying Suspicious URLs: An Application of Large-Scale Online Learning // Proceedings of the International Conference on Machine Learning (ICML), Montreal, Quebec, 2009. — Pp. 681–688.

Выбор регрессионных моделей с анализом мультиколлинеарности*

Крымова Е. А., Стрижов В. В.
ekkrym@gmail.com
Москва, Вычислительный центр РАН

В работе рассматриваются способы порождения моделей с помощью существенно нелинейных параметрических порождающих функций. Предложен алгоритм выбора модели оптимальной структуры, основанный на последовательном порождении моделей максимального правдоподобия. Исследуется расстояние между полученными моделями. Работа алгоритма выбора моделей проиллюстрирована задачей моделирования давления в двигателе внутреннего сгорания.

Feature selection with multicollinearity control in regression analysis*

Krymova K. A., Strijov V. V.
Moscow, Russian Academy of Sciences, Computing Center

We investigate the regression model construction problem. Assume the given set of features to be inefficient to construct the adequate model. We generate new features on the base of a given sample set. The number of the features exceeds the number of the objects after the generation. The features require reduction of multicollinearity. The new feature selection algorithm is developed. Coherent Bayesian Inference is used for feature selection: the set of indices is necessary which corresponds the most evident model. Modelling of the pressure in diesel engine is used as a practical example.

Рассматривается задача выбора признаков при построении линейной регрессионной модели. Предполагается, что исходных признаков недостаточно для построения адекватной регрессионной модели. Предлагается породить новый набор признаков, модифицируя исходные. Будем считать, что для получения адекватной модели необходимо сделать выбор из большого числа признаков.

В работе описан алгоритм отбора признаков, который заключается в последовательном добавлении и удалении признаков. При выборе признаков используется принцип максимума правдоподобия: отыскивается набор признаков, соответствующий модели с максимальным значением правдоподобия [1, 2]. Оцениваются параметры и правдоподобие самых моделей. Шаги добавления и удаления проводятся таким образом, что с увеличением номера шага правдоподобие моделей возрастает.

После добавления признаков возникает проблема мультиколлинеарности, когда имеются признаки, сильно коррелирующие друг с другом. Существуют следующие способы обнаружения мультиколлинеарности: проверка корреляции между признаками [3], исследование факторов инфляции дисперсии (VIF) [4], метод Белсли [5]. Описываемый алгоритм удаляет признаки согласно методу Белсли. Результатом работы алгоритма является наиболее правдоподобная модель, включающая наименее коррелирующие признаки.

Результаты работы предложенного алгоритма сравниваются с результатами работы алгоритма LARS [6]. Сравнение проводится на задаче моделирования давления в камере двигателя внутреннего сгорания.

Постановка задачи

Задана выборка $D = \left\{(\mathbf{x}^i, y^i)\right\}_{i=1}^m$ — множество m пар, $\mathbf{x}^i = (x_j^i)_{j=1}^n$, $\mathbf{x}^i \in \mathbb{R}^n$ — вектор значений n признаков, и одной зависимой переменной $y^i \in \mathbb{R}^1$. Индекс i элементов выборки и индекс j признака далее будем рассматривать как элементы множеств $i \in I = \{1, \ldots, m\}$ и $j \in J = \{1, \ldots, n\}$.

Задан класс регрессионных моделей $\mathcal{F} = \{f_s\}$ — параметрических функций, линейных относительно параметров,

$$y^i = f_s(\mathbf{w}_s, \mathbf{x}^i) = \sum_{j \in J_s} w_j x_j^i, \qquad (1)$$

в которой $s \in \{1, \ldots, 2^n\}$ является индексом модели, $\mathbf{w}_s = (w_j)_{j \in J_s}$ — вектор параметров, заданный индексом модели, $J_s \subseteq J$ — набор индексов признаков. Введено ограничение на число элементов линейной комбинации (1). В множество $\mathcal{F}$ могут входить только модели с числом признаков $|J_s| \leqslant R$.

Принята следующая гипотеза порождения данных. Пусть случайная аддитивная переменная ν регрессионной модели

$$y = f(\mathbf{w}, \mathbf{x}) + \nu$$

имеет нормальное распределение $\mathcal{N}(0, \sigma_\nu^2)$.

Тогда, с учетом гомоскедастичности регрессионных остатков, распределение зависимой переменной имеет вид

$$p(y|x, \mathbf{w}, \sigma_\nu^2, f) = \frac{\exp(-\frac{1}{\sigma_\nu^2} S(D|\mathbf{w}, f))}{(2\pi\sigma_\nu^2)^{\frac{n}{2}}}, \qquad (2)$$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-07-00422-а.

где S — сумма квадратов невязок $y^i - f(\mathbf{w}, \mathbf{x}^i)$. Это распределение задает указанный ниже критерий качества модели.

Дополнительно задано разбиение выборки $I = I^{\mathrm{T}} \sqcup I^{\mathrm{C}}$ на обучающую и контрольную. Для каждого набора данных, рассматриваемого в вычислительном эксперименте, наборы индексов $I^{\mathrm{T}}, I^{\mathrm{C}}$ определены до начала эксперимента. Алгоритм выбора модели определяет метод оптимизации, доставляющий оптимальное значение параметрам $\mathbf{w}$ модели f на обучающей выборке $\{(x^i, y^i)\colon i \in I^{\mathrm{T}}\}$. Принят критерий качества — сумма квадратов регрессионных остатков на контрольной выборке

$$S = \sum_{i \in I^{\mathrm{C}}} \left(y^i - f(\mathbf{w}, \mathbf{x}^i)\right)^2. \qquad (3)$$

Требуется найти такую модель $f_s \in \mathcal{F}$, которая доставляет наименьшее значение функционалу качества (3). Такая модель будет называться моделью оптимальной структуры.

Порождение признаков

Предлагается следующий способ формирования выборки D.

Задано множество признаков $\Xi = \{\xi^u\}_{u=1}^{U}$ и конечное множество функций $G = \{g_v\}_{v=1}^{V}$. Рассмотрим декартово произведение $G \times \Xi$, элементу (g_v, ξ^u) которого поставлена в соответствие суперпозиция $g_v(\xi^u)$, однозначно определяемая индексами v, u. Обозначим $a_i = g_v(\xi^u)$, где индекс $i = (v-1)U + u$.

Назначается базовая модель порождения признаков. В качестве модели, описывающей отношение между зависимой переменной y и переменными a_i, используется полином:

$$y = w_0 + \sum_{\iota=1}^{UV} w_\iota a_\iota + \sum_{\iota=1}^{UV}\sum_{\zeta=1}^{UV} w_{\iota\zeta} a_\iota a_\zeta + \ldots$$
$$\cdots + \sum_{\iota_1=1}^{UV} \cdots \sum_{\iota_z=1}^{UV} w_{\iota_1 \ldots, \iota_z} a_\iota \ldots a_{\iota_z},$$

где вектор коэффициентов

$$\mathbf{w} = (w_0, w_\iota, w_{\iota\zeta}, \ldots, w_{\iota_1 \ldots \iota_z})_{\iota, \zeta, \ldots, \iota_1, \ldots \iota_z = 1, \ldots, m}.$$

Запишем вышеприведенный ряд в виде

$$y = \sum_{j \in J} w_j x^j.$$

Переменные $\{x^j\}$ поставлены в однозначное соответствие мономам полинома.

Алгоритм максимизации правдоподобия

В качестве исходного алгоритма, с которым будет производиться сравнение, был выбран алгоритм LARS, описанный в [6].

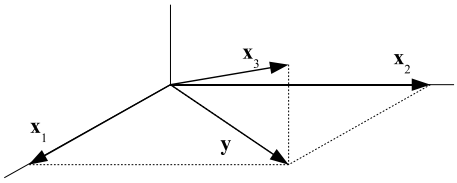


Рис. 1. Пример, иллюстрирующий последовательность выбора признаков.

Для иллюстрации основного недостатка алгоритма LARS рассмотрим следующий пример 1. Пусть матрица X состоит столбцов значений трех признаков. Первый признак $\mathbf{x}_3$ сильно коррелирует с вектором ответов $\mathbf{y}$, который является линейной комбинацией остальных двух признаков $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{x}_2$. LARS на первом шаге выберет признак $\mathbf{x}_3$, так как он сильнее коррелирует с вектором ответов и затем присоединит остальные признаки. Для разрешения этого недостатка предложен алгоритм, позволяющий удалять мультиколинеарные признаки и добавлять признаки, уменьшаюшие ошибку.

Используем два набора признаков: набор $\mathcal{Z}$, который содержит все признаки, и текущий набор $\mathcal{A}$. В начале работы алгоритма $\mathcal{A} = \varnothing$. Рассмотрим k-й шаг алгоритма.

1. Последовательно, из набора $\mathcal{Z} \setminus \mathcal{A}_k$ в текущий набор признаков $\mathcal{A}_k$ добавляются признаки, наиболее коррелирующие с вектором регрессионных остатков.
2. Выполняется прореживание модели: последовательно удаляются те элементы линейной комбинации, заданной набором $\mathcal{A}_k$, для которых критерий мультиколлинеарности принимает максимальное значение.

Добавление (удаление) признаков происходит при возрастающем правдоподобии при недостаточном (избыточном) числе признаков в текущем наборе; когда в наборе окажется избыточное (недостаточное) число признаков, правдоподобие начнет уменьшаться. Шаги добавления или удаления продолжаются до тех пор, пока, число последовательных шагов при уменьшающемся правдоподобии не превзойдет заданное число K.

Сравнение моделей выполняется с помощью связанного Байесовского вывода. Пусть многомерная случайная величина — вектор параметров модели имеет нормальное распределение с нулевым математическим ожиданием и дисперсией α^{-2}. Тогда распределение вектора параметров модели

$$p(\mathbf{w}|\alpha, f) = \frac{1}{(2\pi/\alpha)^{\frac{n}{2}}} \exp\left(-\frac{\alpha}{2}\mathbf{w}^{\intercal}\mathbf{w}\right). \qquad (4)$$

Пусть в (2) $\beta = \sigma_\nu^{-2}$. Тогда α и β — гиперпараметры модели.

Правдоподобие $p(D|f)$ модели f при фиксированных гиперпараметрах:

$$p(D|f,\alpha,\beta) = \int p(D|f,\mathbf{w},\beta,\alpha)p(\mathbf{w}|f,\alpha)d\mathbf{w}. \quad (5)$$

Для каждой модели f, заданной множеством индексов признаков, вычисляются наиболее правдоподобные параметры и гиперпараметры модели.

Обозначим распределение моделей при фиксированных данных $p(f_i|D)$ и рассмотрим числитель формулы Байеса

$$p(f_i|D) = \frac{p(D|f_i)p(f_i)}{p(D)}, \quad (6)$$

в котором правдоподобие моделей $p(D|f_i)$ определяется выражением (5). Будем считать априорную вероятность равной для всех моделей, $p(f_i) = \text{const}$. Так как знаменатель выражения (6) не зависит от выбора модели, то сравнение моделей происходит через вычисление правдоподобия моделей.

Результатом работы алгоритма является модель удовлетворительной точности; мультикоррелирующие признаки исключены.

Критерий мультиколлинеарности

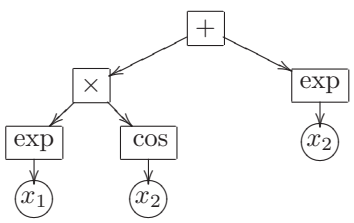
Предложенный алгоритм при исследовании мультиколлинеарости использует метод Белсли.

Проводится сингулярное разложение [7] матрицы признаков $X = U\Lambda V^\intercal$, где $V = (v_{ij})$ — ортогональная матрица, столбцы которой являются собственными числами матрицы ковариаций $X^\intercal X$. Индекс обусловленности с номером i — отношение максимального сингулярного числа к i-му сингулярному числу $\eta_i = \lambda_{\max}/\lambda_i$.

Наличие больших индексов обусловленности η_j означает что есть зависимость между признаками. Рассматриваются собственные векторы матрицы ковариаций соответствующие большим индексам обусловленности. Можно показать, что большие значения $\left(v_{ij}^2/\eta_j^2\right)$ соответствуют коррелирующим признакам.

Расстояние между моделями

Для исследования сходимости введем расстояние между моделями. Модель представлена в виде дерева: нелистовыми вершинами которого являются функции, листовые —признаки. Например, модель $y = w_1 \exp x_1 \cos x_2 + w_2 \exp x_2$ имеет следующее дерево:



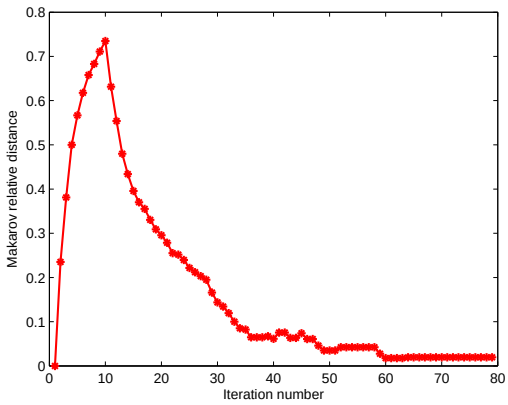


Рис. 2. Зависимость максимального расстояния Макарова R_{ij} между моделями из множества 10 последовательно порожденных моделей от номера итерации.

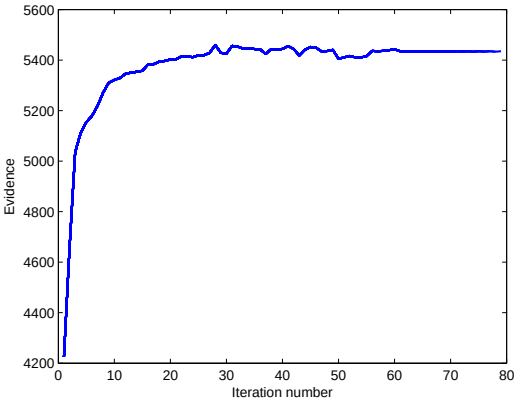


Рис. 3. График значений правдоподобия в зависимости от номера итерации.

Пусть $H_i(V,Z)$ — конечный, помеченный, связный, неориентированный граф без петель и кратных ребер, имеющий множество вершин V_i, $|V_i| = p_i > 0$, и множество ребер Z_i, $|Z_i| = q_i > 0$.

В [8] предложено использовать меру структурного подобия графов, зависящую от числа вершин или ребер их наибольшего общего подграфа, и предложены некоторые меры. Наибольший общий подграф графов H_i и H_j обозначим через $H_{ij}(V_{ij}, Z_{ij})$, $|V_i| = p_i > 0$, $|Z_i| = q_i > 0$, $|V_j| = p_j > 0$, $|Z_j| = q_j > 0$, $|V_{ij}| = p_{ij} \geqslant 0$, $|Z_{ij}| = q_{ij} \geqslant 0$.

Предложены следующие функция расстояния (и показано, что они являются метриками):

$$r_{ij} = q_i + q_j - 2q_{ij};$$
$$R_{ij} = r_{ij}/(q_i + q_j).$$

Вычислительный эксперимент

Работа алгоритма проиллюстрирована на примере данных измерения давления в двигателе внутреннего сгорания. Выборка состоит из набора временных рядов — измерений давления в камере

Таблица 1. Результаты работы алгоритмов выбора признаков.

Алгоритм	CV	AIC	$\lg \varkappa$	k
LARS	0,011	−1346	7	49
Предл.	0,012	−1359	2	30

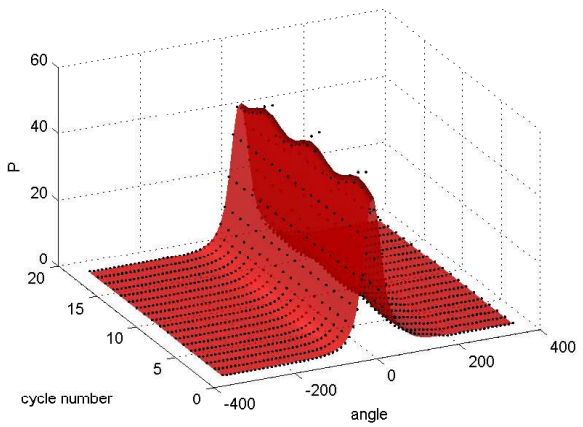


Рис. 4. Модель зависимости давления в камере двигателя внутреннего сгорания от угла поворота коленчатого вала и номера цикла. Точки соответствуют исходным данным.

внутреннего сгорания дизельного двигателя. Каждый временной ряд соответствует одному полному циклу работы двигателя, который состоит из рабочего и холостого тактов. Отчеты временного ряда равномерны и соответствуют углу вращения коленчатого вала. Нулевому углу соответствует верхняя мертвая точка вращения. Начало временного ряда соответствует углу в −360 градусов, конец — углу в +359,9 градусов. Всего один полный цикл насчитывает 7200 отсчетов. Лабораторный эксперимент включал измерения давления 122 полных циклов.

Регрессионная выборка

$$\left\{(\boldsymbol{\xi}^i, y^i)\right\}_{i=1}^m = \left\{(\langle n_i, \delta_i\rangle, P_i)\right\}_{i=1}^m$$

состоит из значений признаков n_i — номера измерения и δ_i — угла вращения коленчатого вала. Каждой паре значений n_i и δ_i, $i = 1, \ldots, m$ соответствует значение давления P_i в камере внутреннего сгорания. Задано множество порождающих функций

$$G = \left\{1/x,\ \sqrt{(|x|)},\ \exp\left(-\tfrac{(x-m_i)^2}{2s_i^2}\right),\ \sin(c_i x)\right\}.$$

Регрессионная выборка была случайным образом разбита на контрольную и обучающую, равные по мощности. Вычислялось значение оценки скользящего контроля CV для фиксированных 10 разбиений выборки, значение информационного критерия Акаике $\mathrm{AIC} = m\ln(S/m) + 2k$, десятичный логарифм числа обусловленности $\varkappa$ матрицы значений отобранных признаков и сложность модели k.

Результаты экспериментов показаны в таблице 1. На рис. 2 и рис. 3 показаны соответственно график зависимости расстояния Макарова R_{ij} между моделями и график зависимости правдоподобия от номера итерации. На рис. 4 показана одна из полученных моделей.

Выводы

Для выбора наилучшей модели из индуктивно заданного множества использован двухуровневый Байесовский вывод. Предлагаемый алгоритм находит оптимальное решение в случае, показанном на рис. 1.

Предлагаемый алгоритм включает процедуру анализа мультиколлинеарности и позволяет получать хорошо обусловленные наборы порожденных признаков. Сравнение с LARS показало, что проверка мультиколлинеарности позволяет существенно уменьшить сложность получаемых моделей при незначительном ухудшении качества.

В результате работы алгоритма получена модель с удовлетворительной погрешностью аппроксимации, а матрица выбранных признаков имеет небольшую обусловленность, поэтому полученное решение устойчиво.

Литература

[1] *Vladislavleva E. J., Smits G. F., den Hertog D.* Order of nonlinearity as a complexity measure for models generated by symbolic regression via pareto genetic programming // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. — 2009. — Vol. 13, No. 2. — Pp. 333–349.

[2] *Bishop C. M.* A new framework for machine learning // Computational Intelligence: Research Frontiers, IEEE World Congress on Computational Intelligence, WCCI 2008, Hong Kong. — Springer, 2008. — Pp. 1–24.

[3] *Draper N. R., Smith H.* Appied Regression Analysis. — John Wihley and Sons, 1998.

[4] *Marquardt D. W.* Generalized inverses, ridge regression, biased linear estimation, and nonlinear estimation // Technometrics. — 1996. — Vol. 12, No. 3. — Pp. 605–607.

[5] *Belsley D. A.* Conditioning Diagnostics: Collinearity and Weak Data in Reggression. — New York: John Wiley and Sons, 1991.

[6] *Efron B., Hastie T., Johnstone I., Tibshirani R.* Least angle regression // The Annals of Statistics. — 2004. — Vol. 32, No. 3. — Pp. 407–499.

[7] *Isenmann A. J.* Modern multivariate statistical techniques. — Springer, 2008. — 734 pp.

[8] *Макаров Л. И.* Метрические свойства функций расстояний между молекулярными графами // Журнал структурной химии. — 2007. — Vol. 48. — Pp. 223–229.

[9] *Tibshirani R.* Regression shrinkage and selection via the lasso // Journal of the Royal Statistical Society. — 1996. — Vol. 32, No. 1. — Pp. 267–288.

Системы тестирования алгоритмов машинного обучения: MLcomp, TunedIt и Полигон*

Лисица А. В., Воронцов К. В., Ивахненко А. А., Инякин А. С., Синцова В. В.
lisitsa@forecsys.ru, voron@ccas.ru, {ivahnenko, inyakin, sintsova}@forecsys.ru
Москва, Вычислительный Центр РАН, ЗАО «Форексис»

«Полигон» — это бесплатная веб-система для тестирования алгоритмов классификации на реальных и модельных данных, разработанная в ВЦ РАН и ЗАО «Форексис». Цель системы — предоставить исследователям и прикладным специалистам удобную площадку для анализа алгоритмов и задач классификации, а также стандартизировать методику тестирования. Аналогичные цели преследуют системы MLcomp и TunedIt. В докладе приводится сравнительный анализ этих трех систем.

Online services for testing machine learning algorithms: MLComp, TunedIt, and Poligon*

Lisitsa A. V., Vorontsov K. V., Ivahnenko A. A., Inyakin A. S., Sintsova V. V.
Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russia; Forecsys, Moscow, Russia

Poligon is a free web-based system developed in Dorodnicyn Computing Centre of RAS and Forecsys company for testing machine learning algorithms on real or model data. Poligon provides a convenient platform for the analysis of classification algorithms and tasks as well as standardize the testing procedure. MLcomp and TunedIt have analogous purposes. This paper gives the comparative study of three systems.

Создание новых алгоритмов классификации является сложной задачей. Для того, чтобы алгоритм был востребован, его эффективность должна быть подтверждена экспериментами на реальных данных. Эксперименты должны быть легко воспроизводимыми, чтобы любой ранее полученный результат можно было перепроверить, и стандартизованными, чтобы результаты, полученные разными исследователями, были сопоставимы.

В машинном обучении точной воспроизводимости достичь довольно сложно, так как это требует соблюдения ряда условий.

1. *Идентичность реализации алгоритма.* Авторы алгоритма не всегда предоставляют его реализацию, ограничиваясь описанием идеи. Если же реализация находится в свободном доступе, то трудно гарантировать, что во всех работах используется одна и та же версия. Получение программы или исходных кодов затруднено или невозможно для коммерческих алгоритмов.
2. *Идентичность методики тестирования.* Описания методики кросс-валидации часто поверхностны и не содержат таких важных деталей, как стратификация выборки по классам или по признакам. Более того, точное воспроизведение результатов эксперимента невозможно без знания множества разбиений выборки на обучение и контроль, которое, как правило, генерируется случайным образом и не запоминается.
3. *Идентичность исходных данных.* Хотя данные, как правило, берутся из одного источника (чаще всего из репозитория UCI [4]), детали предварительной обработки (нормировка, заполнение пропусков, и т. д.) тоже часто опускаются.

Если полученные результаты расходятся, то причиной может быть различие и в реализации алгоритмов, и в методике тестирования, и в данных.

Попытки создания систем для автоматизации экспериментов в машинном обучении неоднократно предпринимались в предыдущие десятилетия, но наталкивались на технологические и организационные трудности. Развитие web-технологий привело к созданию в последние годы нескольких общедоступных систем:

— `poligon.MachineLearning.ru` в России (2008);
— `www.TunedIt.org` в Польше (2008);
— `www.MLComp.org` в США (2009).

Поскольку цели этих систем схожи, их функциональные возможности также схожи. Каждая система имеет пополняемый репозиторий задач и алгоритмов. Пользователь системы может ограничивать доступ к добавленной им задаче или алгоритму. Каждая система использует для тестирования алгоритмов методику кросс-валидации, основанную на многократном разбиении исходной выборки данных на «обучение» и «контроль», и позволяет вычислять среднюю ошибку на контроле для любой пары ⟨задача, алгоритм⟩. Каждая система имеет веб-интерфейс для отображения результатов тестирования алгоритмов.

Все системы одинаково определяют круг своих пользователей. Во-первых, это разработчики алгоритмов, которые получают возможность сравни-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-07-00673, № 08-07-00422) и программы ОМН РАН «Алгебраические и комбинаторные методы математической кибернетики и информационные системы нового поколения».

вать свои алгоритмы со стандартными на представительном наборе реальных задач. Во-вторых, это прикладные специалисты, которые получают возможность выбирать алгоритмы, наиболее подходящие для конкретной задачи, особо не вникая в область машинного обучения В-третьих, все системы возникли как университетские проекты и активно используются в учебном процессе и для организации соревнований по анализу данных. В частности, система Полигон используется на кафедре «Интеллектуальные системы» ФУПМ МФТИ и в Школе анализа данных[1] Яндекс.

Однако имеются и существенные различия в том, где хранятся и как исполняются алгоритмы, какие допускаются типы алгоритмов, как строится множество разбиений, какие характеристики качества вычисляются, и в каком виде выдаются результаты тестирования.

Система TunedIt

Система TunedIt начала разрабатываться в 2008 году. Ее основатель и идейный вдохновитель — Marcin Wojnarski (все началось с его диссертационного проекта; сейчас проект поддерживается Варшавским университетом, а также Технологическим инкубатором Варшавского университета).

Система состоит из трех блоков — «базы знаний», «репозитория задач и алгоритмов» и «тестировщика» (*TunedTester*).

TunedTester позволяет запускать алгоритмы и выгружать результаты тестирования на сервер системы. Этот компонент работает локально, поэтому пользователь должен загрузить и установить на свой компьютер программу с сайта www.tunedit.org. Все необходимые для тестировании задачи и алгоритмы загружаются на компьютер пользователя автоматически при запуске тестирования.

Алгоритмы, используемые *TunedTester*'ом должны быть написаны на языке JAVA. Компонент работает с алгоритмами из библиотек WEKA[2], Rseslib[3] и Debellor[4]. Для добавления алгоритма надо встроить его в одну из этих трех библиотек.

В системе есть стандартная процедура тестирования — разбиение задачи на обучение и контроль (случайное, 70/30). Качество алгоритма оценивается как доля ошибок на контроле. Пользователь может дополнить систему собственной процедурой тестирования (*evaluation procedure*), использующей произвольные разбиения задачи и выдающей на выходе любую другую скалярную величину.

Один запуск *TunedTester*'а заключается в выборе процедуры тестирования, алгоритма и задачи. Результаты тестирования могут быть опубликованы в «базе знаний» на сайте системы. «База знаний» предоставляет интерфейс для сравнения результатов различных алгоритмов. Сравнение возможно только в контексте одной задачи и одной процедуры тестирования. Для каждого алгоритма указывается количество запусков процедуры тестирования, среднее значение и стандартное отклонение данной оценки качества на данной задаче. Для стандартной процедуры тестирования оценкой качества является доля ошибок на контроле.

Подход TunedIt имеет следующие ограничения.

1. Ограничение на язык программирования (JAVA).
2. Отсутствуют механизмы контроля мета-параметров, влияющих на процедуру обучения; например, оценка качества работы SVM может вычисляться при различных ядрах.
3. На выходе процедуры тестирования может быть только скалярная величина, что ограничивает возможности детального анализа.
4. Для тестирования алгоритма необходимо иметь его исполняемый код (*java*-класс), что невозможно в случае коммерческих алгоритмов.

Система MLComp

Система MLComp появилась в конце 2009 года. Её создали аспиранты университета Беркли Jacob Abernethy и Percy Liang. Вычислительные мощности системы расположены в «облаках» Amazon Elastic Compute Cloud[5]. Система предлагает автоматизацию тестирования различных методов машинного обучения: алгоритмов классификации, коллаборативной фильтрации, анализа текста и др.

В MLComp другая схема работы с алгоритмами — алгоритмы исполняются не на стороне пользователя, а на сервере системы. Для тестирования алгоритма пользователь загружает свою программу на сайт и запускает её выполнение (run) на одной из задач. Программа выполняется в среде Linux. Система не накладывает ограничений на язык программирования. Так как алгоритмы выполняются на одном сервере и имеют одинаковые вычислительные ресурсы, в рамках MLComp можно сравнивать скорости работы алгоритмов.

В плане процедур тестирования MLComp значительно уступает TunedIt. Проблема заключается в выбранном подходе к тестированию — формат задачи требует явного указания тестовой и контрольной подвыборок, и эта информация хранится в данных задачи. Все тесты алгоритмов на задаче происходят на одном и том же разбиении, что делает невозможным статистически надежную оценку характеристик качества работы алгоритмов.

[1] http://shad.yandex.ru/

[2] http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/

[3] http://rseslib.mimuw.edu.pl/

[4] http://www.debellor.org/

[5] http://aws.amazon.com/ec2/

Подход MLComp имеет следующие ограничения.

1. Только одно разбиение задачи на обучение и контроль, в результате низкая статистическая надежность получаемых оценок.
2. Для тестирования алгоритма необходимо передать разработчикам системы его исполняемый код (программу), что невозможно в случае коммерческих алгоритмов.
3. Ограничение на операционную систему (Linux).

Система Полигон

Система Полигон была анонсирована в 2007 году на конференции ММРО-13 [1] и начала функционировать в 2008 году. Она имеет несколько существенных отличий от предыдущих систем.

Во-первых, это распределённая система. Каждый алгоритм запускается на компьютере пользователя (как правило, автора алгоритма) и автоматически выполняет задания, поступающие от сервера Полигона. Задания формируются исходя из того, какие отчёты запрашивают другие пользователи. Таким образом, каждый пользователь, предоставляющий системе свой алгоритм, добровольно выделяет часть своего вычислительного ресурса, но сохраняет полный контроль над программой и исходным кодом алгоритма. Программа может быть реализована на любом языке, поддерживающем web-сервисы. Благодаря этим архитектурным особенностям к системе можно подключать коммерческие версии алгоритмов.

Во-вторых, в Полигоне существенно глубже проработана методика тестирования [1, 2]. Для каждой задачи хранится и используется только одно представительное множество разбиений, что обеспечивает воспроизводимость и статистическую надёжность результатов. Наряду со стандартной характеристикой — частотой ошибок на контроле — вычисляется большое количество скалярных и графических характеристик для детального анализа качества алгоритмов.

Информация, полученная в ходе тестирования, сохраняется в базе данных системы и в дальнейшем может многократно использоваться для выдачи отчётов пользователям.

Полигон оперирует с четырьмя типами объектов: *задача*, *разбиение*, *алгоритм* и *статистика*.

Репозиторий задач классификации.

Задача классификации Z описывается в Полигоне следующим набором данных:

— матрица $F = (F_{ij}) \in \mathbb{R}^{L\times n}$ значений j-го признака на i-ом объекте;
— вектор $y = (y_i)_{i=1}^{L} \in Y^L$ правильных ответов;
— матрица $C = (C_{uv}) \in \mathbb{R}^{m\times m}$ стоимости потерь при ошибочном соотнесении объекта класса u к классу v ($|Y| = m$);
— вектор информации $I = (I_j)_{j=1}^{n}$ о типах признаков (номинальный, вещественный).

Задачи могут быть загружены в формате ARFF[6], либо во внутреннем формате Полигона — в виде нескольких csv-файлов с данными. Пользователь, добавивший задачу в систему, может управлять правами доступа к этой задаче.

Методика тестирования [1, 2].

Для каждой задачи Z формируется набор разбиений по стандартной схеме кросс-валидации «10×5-fold CV» и девять наборов по десять случайных разбиений с одинаковой длиной обучения (от 10% до 90% от длины выборки с шагом в 10%). В контроль и обучение объекты разных классов попадают в такой же пропорции, как и в исходной задаче. Полученные разбиения сохраняются в базе данных системы. Если задача Z однажды тестировалась в Полигоне, то система всегда будет использовать разбиения, сформированные при первом тестировании задачи. Тем самым гарантируется, что все алгоритмы тестируются на одинаковых исходных данных.

Репозиторий алгоритмов классификации.

Алгоритм классификации A принимает на входе:

— матрицу обучающей выборки $F = (F_{ij}) \in \mathbb{R}^{\ell\times n}$,
— вектор $y = (y_i)_{i=1}^{\ell} \in Y^\ell$ правильных ответов на обучающей выборке,
— матрицу $C = (C_{uv}) \in \mathbb{R}^{m\times m}$ стоимости потерь,
— вектор информации I о типах признаков,
— вектор W мета-параметров алгоритма,
— матрицу тестовой выборки $F' = (F'_{ij}) \in \mathbb{R}^{k\times n}$,

и выдаёт на выходе:

— ответы $y' = (y'_i) \in Y^k$ на тестовой выборке,
— матрицу оценок $P' = (P'_{iv}) \in [0,1]^{k\times m}$ принадлежности i-го объекта тестовой выборки v-му классу задачи.

Мета-параметры W задаются пользователем перед запуском алгоритма на тестирование. Экземпляры алгоритма A с различными значениями мета-параметров W (а также различных версий) считаются различными, и результаты их тестирования сохраняются в отдельных записях. Это позволяет Полигону лучше обеспечивать воспроизводимость по сравнению с TunedIt.

Взаимодействие с алгоритмами происходит при помощи специальной прослойки AlgProxy[7], которую должен реализовать автор алгоритма. AlgProxy обеспечивает обмен данными между алгоритмом A и веб-сервисом Полигона. Модель вза-

[6] http://weka.wikispaces.com/ARFF+(stable+version)

[7] В первых версиях Полигона [1, 2] взаимодействие с алгоритмами строилось на манер TunedIt при помощи локальной программы «Вычисляющий сервер». В дальнейшем была выбрана модель взаимодействия при помощи веб-сервиса, и необходимость в «Вычисляющем сервере» отпала.

имодействия основана на подходе «клиент-сервер», где AlgProxy — это клиент, а Полигон — это сервер. Инициатором взаимодействия выступает AlgProxy, который постоянно опрашивает Полигон «не появились ли задания для алгоритма A?». Если ответ положительный, то AlgProxy получает задание и начинает выполнение алгоритма A. Задание содержит данные задачи Z, параметры алгоритма W и набор разбиений $S = (S_q)$. AlgProxy тестирует алгоритм A на разбиениях S и передает результаты в систему Полигон. В упрощенном виде схема работы AlgProxy выглядит так:

1) запросить новое задание;
2) если задания нет, то через N секунд перейти к первому пункту;
3) если задание есть, то запросить данные задачи классификации;
4) провести тестирование алгоритма;
5) отправить результаты тестирования на сервер Полигона.

В документации[8] приведена пошаговая инструкция реализации AlgProxy для подключения собственного алгоритма.

Оценки качества алгоритма для задачи.

Статистика — это функция, которая принимает на входе:

— данные задачи классификации Z,
— набор разбиений $S = (S_q)$ задачи Z, использованных при тестировании алгоритма,
— результаты работы алгоритма (y'_q) и (P'_q) на каждом q-ом разбиении,

и выдаёт на выходе:

— скалярное или векторное значение, описывающее одну из характеристик качества алгоритма.

В текущей версии Полигона рассчитываются следующие статистики (некоторые из них подробнее обсуждались в [2]):

— частота ошибок на обучении и на контроле, а также средняя переобученность (с доверительными интервалами);
— среднее смещение и средняя вариация (характеристики адекватности и устойчивости модели);
— доля «шумовых» (где алгоритм часто ошибается), «пограничных» и «эталонных» (на которых алгоритм ошибается редко) объектов;
— распределение частоты ошибок и переобученности (показатели устойчивости классификации);
— зависимость переобученности и частоты ошибок от длины обучения;
— карта ошибок — точечный график: по оси X частота ошибок на обучении, по оси Y частота ошибок на контроле, каждая точка на карте соответствует одному разбиению;
— разделение ошибок на смещение и вариацию (анализ качества модели [3, 2]);
— ROC-кривая и площадь под ROC-кривой (анализ соотношения ошибок I и II рода [5]);
— распределение отступов (margin) объектов: по оси X — объекты, по оси Y — средний отступ объекта от границы класса (ещё одно разделение объектов на «шумовые», «пограничные» и «эталонные»).

Большинство статистик вычисляются как по всей выборке, так и отдельно по классам, а также отдельно для обучающей и контрольной выборки (если это осмысленно).

Результаты расчетов могут быть выгружены в «сыром» виде, что позволяет пользователю дополнить имеющиеся статистики собственными.

Пока текущая версия Полигона имеет два существенных ограничения: поддерживается только один тип задач (классификации) и отсутствует интерфейс и документация на английском языке.

Выводы

Благодаря архитектурным решениям, основанным на web-сервисах, и стандартизованной методике тестирования, система Полигон обладает лучшими характеристиками воспроизводимости по сравнению с системами TunedIt и MLComp. Полигон не накладывает ограничений на язык программирования и операционную систему при реализации алгоритмов. Алгоритмы исполняются на локальных машинах, что делает возможным тестирование их коммерческих версий. Применяемая методика тестирования позволяет использовать Полигон не только как средство вычисления и хранения результатов тестирования, но и как инструмент для исследования задач и алгоритмов классификации.

Литература

[1] *Воронцов К. В., Инякин А. С., Лисица А. В.* Система эмпирического измерения качества алгоритмов классификации // Всеросс. конф. ММРО-13. — М.: МАКС Пресс, 2007. — С. 577–581.

[2] *Воронцов К. В., Ивахненко А. А, Инякин А. С., Лисица А. В., Минаев П. Ю.* «Полигон» — распределённая система для эмпирического анализа задач и алгоритмов классификации // Всеросс. конф. ММРО-14. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 503–506.

[3] *Domingos P.* A unified bias-variance decomposition and its applications: ICML'17. — 2000. — Pp. 231–238.

[4] *Frank A., Asuncion A.* UCI Machine Learning Repository // University of California, Irvine, School of Information and Computer Sciences, 2010. `www.ics.uci.edu/~mlearn/MLRepository.html`.

[5] *Hand D., Till R.* A simple generalization of area under the ROC curve for multiple class classification problems // Machine Learning, 45. — 2001. — Pp. 171–186.

[8] Документация системы в формате *wiki* расположена по адресу `http://www.MachineLearning.ru/wiki/index.php?title=Полигон_алгоритмов/Документация`

Экспертно-статистическая обработка информации и метод аналогов как средство искусственного интеллекта*

Мандель А. С.
manfoon@ipu.ru
Москва, Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН

Представлено описание экспертно-статистических систем (ЭСС) управления (принятия решений) и идентификации и один из инструментов экспертно-статистической обработки информации — метод аналогов. Кратко описывается применение метода аналогов для решения задачи прогнозирования. На базе развития метода аналогов для систем поддержки принятия решений сформулирована проблема идентификации логической функции высказываний, описывающей процесс классификации в исполнении взаимодействующего с ЭСС эксперта.

Expert-statistical information processing and analogs method as AI-tool*

Mandel A. S.
Trapeznikov Institute of Control Sciences RAS, Moscow, Russia

The outline of control (decision making) and identification expert-statistical systems (ESS) with one of the main instruments for expert-statistical information processing — analogs method — is presented. The usage of analogs method for time series prediction is described in brief. The problem of proposition logic function identification at the basis of analogs method extension for decision support systems is formulated.

Введение

В середине 90-х годов прошлого века в ИПУ РАН был предложен инструмент интеграции разнородной информации в рамках единой системы управления, который получил название экспертно-статистических методов (ЭСМ) обработки информации ([1] и [2]). Основным объектом применением нового инструмента стали социально-экономические и организационные системы управления. В 2006 г. ЭСМ были распространены на решение задач управления и идентификации технологических процессов [3].

Представлено краткое введение в экспертно-статистический подход к обработке информации и дано описание экспертно-статистических систем управления и идентификации. Обсуждаются предложенный в 2002 г. экспертно-статистический метод аналогов ([4] и [5]) и возможности его дальнейшей «интеллектуализации».

Экспертно-статистическая обработка информации

Структурно экспертно-статистическая система (ЭСС) обработки информации может быть представлена в виде трёх взаимодействующих между собой блоков: блока базисной модели, блока сбора и обработки экспертной информации и блока интеграции экспертной информации в блок базисной модели Наибольший интерес представляет собой блок интеграции экспертной информации в базисную модель. Именно структура и алгоритмическое наполнение этого блока определяет возможность успешного решения соответствующей задачи управления (принятия решений).

Этот блок представляет собой совокупность процедур (методик проведения интервью, опросов, анкетирования и пр.) извлечения экспертных знаний и формируемой в результате соответствующих процедур извлечения (сбора) знаний упрощённой разновидности экспертной системы (ЭС). Однако в большинстве случаев, в отличие от обычных систем, работающих со знаниями, ЭС, которые входят в состав ЭСС, как правило, гораздо проще.

Утверждение 1. *Априорные данные, пополненные, быть может, той информацией, которая поступит в интервале от момента окончания предварительного обследования до момента создания эскизной модели, образуют обучающую выборку. Если остаточная дисперсия окажется на этой обучающей выборке мала, то можно утверждать, что, в конечном счёте, искомого качества управления можно будет достичь на пути создания ЭСС (а не ЭС).*

При использовании ЭСС условность любых «строгих» выводов обусловлена тем, что даже при малых значениях остаточной дисперсии (полученных на обучающей выборке!) нет никаких гарантий, что лицо, принимающее решения, (ЛПР) примет рекомендации, полученные по идентифицированной модели, к исполнению. За подобным отказом могут скрываться как ошибки или нерешительность ЛПР, так и его уверенность в том, что обучающая выборка не является статистически представительной (не содержит информации обо всех важных «режимах» функционирования описываемого объекта).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, грант № 09-07-00195-а.

Яркой иллюстрацией к этим рассуждениям является картина, которая наблюдается при автоматизации сложных технологических процессов в таких областях, как химия, нефтехимия, нефтепереработка и многие другие (см., например, [6–8]). В этом случае классические успешные попытки автоматизации и предшествующие им этапы идентификации сводятся к применению двух основных подходов.

Первый из них заключается в формировании комплекса сложных нелинейных статических моделей, которые строятся методами кусочной аппроксимации ([6] и [7]). Этот подход позволяет без труда моделировать многорежимные объекты, однако ни в малейшей степени не отображает характера их динамики.

Второй подход (который используется, в том числе, и для создания тренажёров [8]) опирается на описание технологического процесса с помощью совокупности локальных физико-химических моделей с последующим объединением их в глобальную модель с учётом геометрии и физико-механических свойств соединяющих локальные процессы транспортных устройств. Данный подход по сравнению с первым кажется поначалу более адекватным реальному процессу, однако гораздо хуже справляется с многорежимностью. С целью повышения его адекватности проводятся эксперименты по моделированию рассматриваемого технологического процесса с последующим предъявлением результатов моделирования экспертам-технологам. Изучив результаты моделирования, технологи формулируют свои замечания, сообщая как, по их мнению, должен был бы вести себя процесс в предъявленных ситуаций. Их пожелания отображаются в некую разновидность ЭС, которая подменяет созданный комплекс физико-химических и физико-механических моделей в отмеченных экспертами-технологами критических ситуациях.

В качестве альтернативы (или дополнения) к рассматриваемым подходам можно использовать экспертно-статистический поход, очертив при этом, хотя бы качественно, границы его применимости.

К тезису, содержащемуся в утверждении 1, непосредственно примыкает и еще один вывод относительно ЭСС, который составляет суть следующего утверждения.

Утверждение 2. *Системы экспертно-статистической обработки дополняют традиционные системы управления и экспертные системы (ЭС) и отличаются от ЭС тем, что дешевле и проще (в части использования методологии искусственного интеллекта), так как не требуют применения специально организованных процедур извлечения знаний и формирования слишком сложных правил вывода.*

Метод аналогов в задачах прогнозирования

Изначально метод аналогов, как инструмент экспертно-статистической обработки информации при решении проблемы инntеграции экспертной информации в блок базисной модели [9, 10], был предложен для решения задачи прогнозирования коротких временных рядов [11].

Метод аналогов основан на предположении о том, что при прогнозировании временных рядов в ряде предметных областей эксперты пытаются строить прогнозы, основываясь на имеющихся у них представлениях о тех объектах или процессах, предыстория которых им, экспертам, полностью известна. Предполагается также, что число таких объектов или процессов достаточно велико и что пространство признаков объектов, информация о которых составляет основное содержание профессионального опыта экспертов, поддаётся чёткой или — что встречается достаточно часто — размытой классификации [12–16]. Формально это означает, что для заданного функционала метрического типа

$$D = \sum_i p^{A_i} \chi\left(\frac{M^{A_i}}{p^{A_i}}\right),$$

где χ — выпуклая функция, A_i — классы точек, p^{A_i} — априорные вероятности классов A_i, а M^{A_i} — первые ненормированные моменты классов A_i, можно построить алгоритмы (в частности, рекуррентные) отыскания его экстремума. При этом принадлежность к классу (если он — чёткий), устанавливается характеристической функцией, принимающей на объекте, принадлежащем фиксированному классу, значение 1 (в противном случае она равна 0), а если класс — нечёткий (размытый), то — функцией принадлежности $h_i(x) : 0 \leqslant h_i(x) \leqslant 1$, причем $\sum\limits_i (h_i(x))^2 = 1$.

Фактически это означает, что опыт эксперта может быть определённым образом структурирован, однако явной необходимости в выполнении подобной классификации в пространстве признаков объектов, вообще говоря, нет, поскольку эксперт самостоятельно распоряжается имеющимся у него опытом, а схема автоматической классификации — это просто формальная модель структуры рассматриваемого пространства.

Структуризация и анализ собственного опыта позволяют эксперту для каждого из вновь предъявленных ему временных рядов (который в дальнейшем называется *объектом прогнозирования*, ОП) формировать список ранее наблюдавшихся объектов, которые с его, эксперта, точки зрения являются аналогами нового ОП.

Предъявленный эксперту ОП представляет собой отрезок временного ряда длины N: $y(t)$, $t =$

$= 0, \ldots, N$ (в частном случае N может быть равно 0: случай полного отсутствия выборки данных). В ответ на предъявленную ему выборку данных (и/или сообщаемое ему наименование ОП) эксперт формирует перечень объектов-аналогов, которые представлены в базе данных системы прогнозирования «полными» временными рядами, то есть рядами, длина которых существенно превосходит величину N.

Пусть Z — множество номеров указанных экспертом объектов-аналогов, для каждого из которых эксперт имеет право (но не обязан) задать ещё две числовые характеристики: коэффициент сходства l_k, $k \in Z$, (если значение коэффициента сходства не задано, то, по умолчанию, он полагается равным единице) и коэффициент масштаба s_k, $k \in Z$ (если значение коэффициента масштаба не задано, то, по умолчанию, оно также полагается равным единице).

Итак, в результате взаимодействия эксперта с ЭСС прогнозирования формируется множество Z аналогов рассматриваемого ОП. Для данного множества аналогов в базе данных ЭСС прогнозирования содержится информация о «полных», то есть представленных гораздо более длинными временными рядами, реализациях процесса функционирования объектов-аналогов. Эта информация представляет собой набор $\{x_k(n),\ k \in Z,\ n = 0, \ldots, N_1\}$, где $N_1 \gg N$. Кроме того, заданы также множества значений коэффициентов сходства $\{l_k, k \in Z\}$ и коэффициентов масштаба $\{s_k, k \in Z\}$.

Теперь для вычисления прогноза значений временного ряда ОП в моменты времени n, $n > N$, можно воспользоваться следующей формулой:

$$\hat{y}(n) = \frac{1}{L}\sum_{k \in Z} \alpha_k l_k s_k x(n), \qquad (1)$$

где $L = \sum\limits_{k \in Z} l_k$. При $N > 0$ значения коэффициентов α_k, $k \in Z$, из формулы (1) определяются в результате решения следующей задачи минимизации:

$$\min_{\{\alpha_k, k \in Z\}} \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{1}{L} \sum_{k \in Z} \alpha_k l_k s_k x(n) \right)^2. \qquad (2)$$

Если $N = 0$, то есть выборка данных по ОП вообще отсутствует, то все α_k, $k \in Z$, полагаются равными 1.

Метод аналогов как средство искусственного интеллекта

В последние годы метод аналогов получил своё развитие и нашел новые широкие применения и, в частности, при решении задач планирования профессиональной подготовки специалистов в области информационно-коммуникационных технологий [17], проблем управления сложными организационными системами [18], управления запасами и производством [3] и в сфере исследования инвестиционной привлекательности предприятий самого разного профиля [19, 20].

Накопленный опыт позволил сформулировать несколько новых проблем и очертить направления развития теории экспертно-статистической обработки информации, вообще, и метода аналогов, в частности.

Суть метода аналогов заключается в том, что при нехватке (для формирования статистически достоверной модели) информации объективного происхождения приходится прибегать к помощи экспертов, которые указывают на аналоги исследуемого объекта (ИО), изучаемого, например, на предмет вложения в него инвестиций. Эти объекты-аналоги отличаются от ИО тем, что по ним уже собрана и доступна представительная ретроспективная (статистическая) информация о результатах их функционирования. Рассмотрим случай, когда каждый из объектов i, $i = 1, \ldots, I$, который может быть использован в качестве аналога, охарактеризован вектором атрибутов $\boldsymbol{x}_i$.

Вводя метрику $m(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ в пространстве атрибутов X, можно попытаться осуществить классификацию объектов [21] с учителем и без учителя (автоматическая классификация), рассматривая в качестве учителя взаимодействующего с ЭСС эксперта. При этом учитель, указывая на объекты-аналоги, относит их к одной из нескольких групп. Например, в случае оценки инвестиционной привлекательности ИО [20] к одной из следующих четырёх групп: «безусловно привлекательные», «спекулятивно привлекательные», «сомнительные» и «заведомо непривлекательные». Если классы, которые выделяются при таком показе, оказываются «плотными», то есть разделяющие их поверхности достаточно гладки, то можно поставить следующую задачу: найти (идентифицировать) логическую функцию F от некоторой совокупности высказываний по поводу значений атрибутов $\boldsymbol{x}_i = \left(x_i^{(1)}, \ldots, x_i^{(L)}\right)$, где L — число разных атрибутов. Примерами таких высказываний могут быть утверждения типа «если $\left(x_i^{(1)} > x_i^{(4)}\right) \vee \left(x_i^{(3)} > x_i^{(2)}\right)$, то объект относится к группе инвестиционно привлекательных» или «если $\left(x_i^{(3)} < M\right) \wedge \left(x_i^{(5)} \geqslant x_i^{(1)}\right)$, то объект относится к группе сомнительных».

В том случае, когда «обучение с учителем» формирует набор сложно взаимодействующих между собой классов, напрашивается вывод о том, что соответствующая проблемная область не поддаётся анализу средствами искусственного интеллекта и процесс обработки информации, включая формирование окончательных решений, так и останется человеко-машинным, то есть будет вестись стандартным путём экспертно-статистической обработки информации.

Выводы

Рассмотрен экспертно-статистический подход к решению задач управления и идентификации на базе метода аналогов, суть которого заключается в том, чтобы, воспользовавшись естественным для человека способом действий на базе накопленного опыта («по аналогии»), соединить это умение с возможностями статистической обработки информации.

Намечены пути совершенствования и развития метода аналогов на базе постановки и решения задач идентификации (по результатам эксперимента) логических функций.

Литература

[1] *Мандель А. С.* Экспертно-статистические системы в управлении и обработке информации. Часть I. // Приборы и системы управления. — 1996. — № 12.

[2] *Мандель А. С.* Экспертно-статистические системы в управлении и обработке информации. Часть II. // Приборы и системы управления. — 1997. — № 1.

[3] *Мандель А. С.* Экспертно-статистические методы обработки информации в интегрированных системах управления производством и технологическими процессами // Проблемы управления. — 2006. — № 6. — С. 55–59.

[4] *Беляков А. Г., Мандель А. С.* Прогнозирование временных рядов на базе метода аналогов (элементы теории экспертно-статистических систем). — М.: ИПУ РАН, 2002. — 60 с.

[5] *Беляков А. Г., Мандель А. С.* Анализ достоверности выводов, формируемых с помощью экспертно-статистических систем. — М.: ИПУ РАН, 2002. — 64 с.

[6] *Дорофеюк А. А., Касавин А. Д., Торговицкий И. Ш.* Контроль качества и восстановление характеристик объектов, работающих в нескольких режимах. // Доклады II Всесоюзного совещания по статистическим проблемам теории управления. Идентификация.— М.: Наука, 1970. — С. 181–182.

[7] *Касавин А. Д.* Адаптивные алгоритмы кусочной аппроксимации в задаче идентификации // Автоматика и телемеханика.— 1972. — № 12.

[8] *Дозорцев В. М., Кнеллер Д. В.* Типовой тренажёрный комплекс для обучения операторов ТП // Автоматизация в промышленности. — 2003. — № 2. — С. 9–14.

[9] *Мандель А. С.* Метод аналогов в прогнозировании коротких временных рядов. // Автоматика и телемеханика. — 2004. — № 4. — С. 143-152.

[10] *Mandel A. S., Belyakov A. G., Semenov D. A.* Expert-Statistical Processing of Data and the Method of Analogs in Solution of Applied Problems in Control Theory //Preprints of the 17th World Congress. July 6-11, 2008, Seoul, Korea.

[11] *Box, G.E.P. and Jenkins, G.M.* Time Series Analysis. — Forecasting and Control. San Francisco: Holden-Day, 1970.

[12] *Дорофеюк А. А.* Алгоритмы автоматической классификации // Автоматика и телемеханика. — 1971. — № 12.

[13] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Вариационный подход к решению задач автоматической классификации для одного класса аддитивных функционалов // Автоматика и телемеханика. — 1978. — № 8.

[14] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Рекуррентные алгоритмы автоматической классификации // Автоматика и телемеханика. — 1982. — № 3.

[15] *Бауман Е. В.* Методы размытой классификации (вариационный подход) // Автоматика и телемеханика. — 1988. — № 12.

[16] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Классификационный анализ данных // Избранные труды I Международной конференции по проблемам управления. М.: СИНТЕГ, 1999.

[17] *Дорофеюк А. А., Мандель А. С., Чернявский А. Л., Никитин В. В., Мальцева С. В.* Классификационные алгоритмы агрегирования объектов профессиональной деятельности в задаче формирования профессиональных и образовательных стандартов // Таврический вестник информатики и математики. — 2008. — № 2. :— С. 49–58.

[18] *Дорофеюк А. А., Мандель А. С., Чернявский А. Л., Лифшиц Д. В.* Классификационные алгоритмы оценки эффективности и поддержки принятия решений в задачах управления ЖКХ мегаполиса Москва //Таврический вестник информатики и математики. — 2008. — № 2. — С. 42–48.

[19] *Беляков А. Г., Мандель А. С., Сизых Д. С.* Метод аналогов как инструмент экспертно-статистической оценки перспективности инвестиционных проектов // Управление развитием крупномасштабных систем MLSD'2008. Материалы Второй Международной конференции (1–3 октября 2008 г., Москва, Россия). Том 1. — М.: ИПУ РАН. 2008. — С. 142–144.

[20] *Сизых Д. С.* Особенности процесса и методов привлечения инвестиций в условиях глобализации и финансового кризиса // Управление развитием крупномасштабных систем, MLSD'2009. Материалы Третьей Международной конференции (5-7 октября 2009 г., Москва, Россия). Том I. — М.: ИПУ РАН, 2009. — С. 351–352.

[21] *Аркадьев А. Г., Браверман Э. М.* Обучение машины классификации объектов. — М.: Физматлит, 1971. — 200 с.

Экспертно-классификационная и экспертно-статистическая обработка информации и принятие решений*

Мандель А. С., Дорофеюк Ю. А.
manfoon@ipu.ru
Москва, Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН

Развивается подход к разработке алгоритмического обеспечения систем поддержки принятия решений, базирующийся на комбинированном использовании алгоритмов экспертно-классификационнного анализа и экспертно-статистической обработки информации. Сформулирована проблема идентификации бинарной логической функции от предикатов, сформированных на этапе обучения СППР, на котором реализуются процедуры типа процедур обучения с учителем, когда в роли учителя выступает лицо, принимающее решения.

Expert-classified and expert-statistical information processing and decision making*

Mandel A. S, Dorofeyuk Yu. A.
Trapeznikov Institute of Control Sciences RAS, Moscow, Russia

Combination of expert-classification and expert-statistical procedures is used to provide algorithmic basis for decision support system (DSS). The problem of predicate binary logic function identification is formulated. These predicates are derived during the stage of DSS supervised learning on the basis of decision making person activity.

Введение

Характерной особенностью создания систем поддержки принятия управленческих решений (СППР) является практически полное отсутствие единой системы оценки эффективности управления деятельностью почти каждого из управляемых объектов, да ещё в отсутствие необходимой для работы такой системы системы мониторинга соответствующих первичных показателей. Это делает невозможным формирование объективных и комплексных оценок эффективности и разработку научно-обоснованных мер по ее дальнейшему совершенствованию. С другой стороны, в подобных системах задействованы колоссальные людские и финансовые ресурсы, поэтому несовершенство вновь создаваемой или неадекватная оценка действующей системы управления, в том числе и по оценке эффективности работы её основных звеньев, приводит к существенным потерям [1].

В настоящей работе развивается предложенный в [2] подход к разработке алгоритмического обеспечения СППР, базирующийся на объединении алгоритмов экспертно-классификационнного анализа и экспертно-статистической обработки информации.

Краткое описание предлагаемой методологии

Основными компонентами предлагаемой методологии оценки эффективности и принятия решений [3] являются:

- формирование системы показателей, необходимых для оценки реальной эффективности основных управляемых объектов системы, которые можно надёжно собирать с заданной периодичностью;
- разработка схемы мониторинга этих показателей;
- разработка критериев оценки эффективности основных объектов управления на базе сформированной системы показателей и экспертно-классификационных методов обработки информации;
- создание модели и методики оценки эффективности системы управления отдельными объектами с применением экспертно-статистических средств обработки мнений экспертов на базе замеряемых показателей и выбранных критериев [3, 4].

Экспертно-классификационный подход к решению задачи агрегирования первичных показателей

Выбор показателей эффективности и информативное агрегирование первичных показателей должно базироваться на апробированных методах статистического анализа и экспертизы (факторный анализ, автоматическая классификация, многовариантная экспертиза, экспертно-статистическое оценивание и т. п.). Воспользуемся для решения проблемы агрегирования первичных показателей методологией экстремальной группировки параметров и алгоритмами решения задач автома-

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, грант № 09-07-00195-а.

тической классификации сложно организованных данных [5–8].

Экстремальная группировка параметров. Методология экстремальной группировки параметров предназначена для решения проблемы сокращения числа исходных (первичных) показателей (по сути своей являющихся случайными величинами) функционирования сложной системы с целью выделения относительно небольшого числа наиболее информативных агрегированных показателей (факторов), которые могли бы быть предъявлены лицу, принимающему решения (ЛПР) относительно эффективности используемых схем управления соответствующей системой. При этом выделяемые в результате группировки агрегированные показатели обладают тем свойством, что они содержат в себе всю существенную информацию о характере происходящих в системе процессов и могут быть охарактеризованы функциональными связями с собираемыми в результате мониторинга первичными показателями. Например, быть взвешенными суммами каких-то первичных показателей.

В дальнейшем коэффициент корреляции (или ковариации) $\rho_{x,y}$ двух случайных величин x и y (первичных показателей) обозначается как $\rho_{x,y} = (x,y)$. Для дисперсии $\rho_{x,x}$ случайной величины x будет применяться обозначение $\rho_{x,x} = (x,x) = x^2$.

Множество первичных показателей (случайных величин) $x_1, \ldots, x_k$ разбито на непересекающиеся группы $A_1, \ldots, A_s$. Заданы случайные величины $f_1, \ldots, f_s$ такие, что $f_1^2 = \cdots = f_s^2 = 1$, которые будем называть факторами. Введем в рассмотрение функционал

$$J^* = \sum_{x_i \in A_1} (x_i, f_1)^2 + \cdots + \sum_{x_i \in A_s} (x_i, f_s)^2 . \qquad (1)$$

Тогда задача экстремальной группировки показателей ставится как задача максимизации функционала (1) как по разбиению показателей на множества $A_1, \ldots, A_s$, так и по выбору случайных величин $f_1, \ldots, f_s$, $f_l^2 = 1$, $l = 1, \ldots, s$.

Методология автоматической классификации. Методология автоматической классификации предназначена для решения проблемы ранжирования различных объектов управления по каждому из выделенных на этапе экстремальной группировки информативных агрегированных показателей (факторов).

Формальная постановка задачи автоматической классификации основана на введении в рассмотрение функционала, зависящего от конкретного разбиения пространства первичных показателей X на области. Экстремум этого функционала должен соответствовать интуитивному представлению о разбиении пространства X на «компактные» области. В настоящей работе для этой цели используется функционал средней близости точек в классах [5–7]:

$$J_1 = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{r} K(A_i, A_i) \qquad (2)$$

Здесь через

$$K(A_i, A_i) = \frac{2}{n_i(n_i - 1)} \sum_{i=1}^{n_i} \sum_{j>i} K(x_i, x_j) \qquad (3)$$

обозначена средняя близость точек в классе A_i, где

$$K(x_i, x_j) = \frac{1}{1 + \alpha\, R^p(x_i, x_j)} \qquad (4)$$

— потенциальная функция, определяющая меру близости точек x_i и x_j, $R(x_i, x_j)$ — евклидово расстояние между точками x_i и x_j в пространстве параметров, α и p — настраиваемые параметры алгоритма, n_i — число точек в классе A_i.

Требуется разбить пространство X на r областей (а при одномерной классификации — ось значений показателя на r интервалов) таким образом, чтобы доставить максимум функционалу (2).

Выделенные в результате автоматической классификации области на шкале значений каждого из агрегированных показателей становятся оценками (в баллах) качества (эффективности управления) по данному показателю рассматриваемого объекта управления.

Корректировка результатов агрегирования с использованием экспертных и экспертно-статистических процедур

В результате решения задачи классификационной обработки системы первичных показателей $\{x_i\}_{i=1}^N$, где N — число первичных показателей (*статистической информации*)

1) формируется список агрегированных информативных показателей $\{y_j\}_{j=1}^M$ — факторов, число которых M существенно меньше числа первичных показателей;
2) оцениваются их значения в первично выбранных балльных шкалах.

При этом указываются формулы связи между факторами и системой первичных показателей и оцениваются различные статистические характеристики:

а) коэффициенты $\{\alpha_{ij}\}$, $i = 1, \ldots, N$, $j = 1, \ldots, M$, модели связи критериев и первичных показателей: $y_j = \sum_{i=1}^{N} \alpha_{ij} x_j$, $j = 1, \ldots, M$ (при этом $\alpha_{ij_1} \times \alpha_{ij_2} = 0$, если $j_1 \neq j_2$ для всех $i = 1, \ldots, N$, то есть каждый из критериев зависит от своей, не пересекающейся с другими системы первичных показателей) — эти коэффициенты называются *силами связи*;

б) расстояния $\{\rho_{\min}^{(j)}\}$, $j = 1, \ldots, M$, $m \neq n$, между выделенными при балльном ранжировании каждого из критериев (на первом этапе разделение значений критериев осуществляется по 4 рангам — 4-балльное ранжирование: $m, n = 1, 2, 3, 4$) группами (*классами*) — эти расстояния называются *степенями различимости балльных оценок по j-му критерию.*

Для уточнения результатов агрегирования и сформированного в результате списка показателей эффективности функционирования отдельных объектов управления предлагается воспользоваться методологией экспертно-статистической обработки информации [9, 10].

В соответствии с организационной схемой, описанной в работе [9], на следующем этапе списки критериев и бальные значения критериев поступают в распоряжение экспертов, которым предстоит выработать варианты решений по сравнительной оценке отдельных объектов управления, которые передаются *лицу, принимающему решение* (ЛПР), об окончательной сравнительной оценке отдельных объектов управления. При этом организуется процедура экспертно-статистической обработки результатов классификационного анализа, суть которой состоит в том, что эксперты получают право на:

а) изменение списка критериев (введение новых критериев, удаление предложенных критериев);
б) изменение моделей связи между критериями и первичными показателями (на уровне предложений о включении в модели связи новых первичных показателей, исключении из моделей связи предложенных первичных показателей, при этом эксперты не могут предлагать значения коэффициентов (*сил связи*);
в) корректировку значений предложенных критериев (в баллах);
г) изменение в сторону увеличения или уменьшения числа выделенных по каждому из критериев классов (*диапазона шкалы* каждого из критериев).

Для этого организуется интерактивная процедура взаимодействия экспертов с системой поддержки принятия решений (СППР), в рамках которой любое из предложений экспертов по внесению указанных выше вариантов изменений система «комментирует», предлагая вниманию экспертов (на основе имеющейся в БД системы статистической информации) оценки последствий предлагаемых ими изменений. Получив в свое распоряжение комментарии системы, эксперты имеют право дезавуировать «возражения» СППР и (1) подтвердить некоторые (или все) из предложенных ими изменений или (2) согласиться с ними, отказавшись от части (или всех) предлагаемых ими изменений. В случае подтверждения всех или части изменений СППР осуществляет пересчет решения с учетом всех подтвержденных изменений и формирует новые значения критериев в баллах, которые снова предлагаются вниманию экспертов. Процедура продолжается до тех пор, пока эксперты не откажутся от внесения каких бы то ни было изменений. При отказе экспертов от всех предложенных ими изменений сформированная в результате система критериев и сформированных СППР передается ЛПР для выработки окончательного решения.

Лицо, принимающее решения, имеет право на внесение всех упомянутых выше изменений, вплоть до требования агрегирования всех критериев в один единственный критерий оценки эффективности объектов управления с целью расстановки их по местам.

Идентификация логических функций и исчисление предикатов

Вводя ту или иную метрику $m(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ в пространстве первичных показателей X или пространстве факторов, можно попытаться осуществить классификацию объектов на базе применения метода аналогов [10] с учителем и без учителя (автоматическая классификация) [11], рассматривая в качестве учителя взаимодействующего с ЭСС эксперта (ЛПР). При этом ЛПР, указывая на объекты-аналоги, относит их к одной из нескольких групп. Если классы, которые выделяются при таком показе, оказываются «плотными», то есть разделяющие их поверхности достаточно гладки, то можно поставить следующую задачу: найти (идентифицировать) логическую (например, булеву) функцию F от некоторой совокупности предикатов [12], заданных на пространстве первичных показателей X. Итак, если набор первичных показателей для i-го объекта управления представляется вектором $\boldsymbol{x}_i = \left(x_i^{(1)}, \ldots, x_i^{(L)}\right) \in X$, где L — число различных первичных показателей, то примерами таких предикатов могут быть высказывания вида «если $\left(x_i^{(1)} > x_i^{(4)}\right) \vee \left(x_i^{(3)} > x_i^{(2)}\right)$, то объект относится к классу 1» или «если $\left(x_i^{(3)} < M\right) \wedge \left(x_i^{(5)} \geqslant x_i^{(1)}\right)$, то объект относится к классу 2» и т. д.

В том случае, когда «обучение с учителем» формирует набор сложно взаимодействующих между собой классов, можно сделать вывод о том, что соответствующая проблемная область не поддаётся анализу средствами искусственного интеллекта и процесс обработки информации, включая формирование окончательных решений, так и останется человеко-машинным, то есть будет вестись стандартным путём экспертно-статистической обработки информации.

Выводы

Рассмотрена возможность использования комбинации экспертно-классификационного и экспертно-статистического подходов к обработке информации в качестве алгоритмической базы для создания систем поддержки принятия решений (СППР).

Поставлена задача идентификации функций бинарной логики от предикатов, формируемых на этапе обучения СППР по результатам действий экспертов.

Литература

[1] *Мандель А. С., Дорофеюк А. А., Чернявский А. Л., Лифшиц Д. В.* Экспертно-классификационные методы оценки эффективности и поддержки принятия решений в задачах управления ЖКХ мегаполиса Москва. // Таврический вестник информатики и математики, 2008. № 2 — С. 42–48.

[2] *Литвак Б. Г.* Экспертные оценки и принятие решений. — М.: Патент, 1996. — 271 с.

[3] *Мандель А. С.* Моделирование действий экспертов в процессе принятия ими прогностических решений //Автоматизация в промышленности, — 2004. — № 7. — С. 50–54.

[4] *Мандель А. С.* Экспертно-статистические методы обработки информации в интегрированных системах управления производством и технологическими процессами //Проблемы управления. — 2006. — № 6. — С. 55–59.

[5] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Классификационный анализ данных // Труды Международной конференции по проблемам управления.Том 1. — М.: СИНТЕГ, 1999. — С. 62–77.

[6] *Дорофеюк А. А., Чернявский А. Л.* Алгоритмы построения хорошо интерпретируемых классификаций // Третья международная конференция по проблемам управления (20 – 22 июня 2006 года): Пленарные доклады и избранные труды. — М.: ИПУ РАН, 2006. — С. 131–133.

[7] *Чернявский А. Л., Покровская И. В.* Методы классификационного анализа данных в задаче оценки социального развития регионов // Искусственный интеллект, — 2006. — № 2. — С. 343–346.

[8] *Дорофеюк Ю. А.* Комплексный алгоритм автоматической классификации и его применение для анализа и принятия решений в больших системах управления // Теория активных систем. Труды международной научно-практической конференции. — М.: ИПУ РАН. 2007. — С. 39-42.

[9] *Беляков А. Г., Мандель А. С.* Прогнозирование временных рядов на основе метода аналогов (элементы теории экспертно-статистических систем). — М.: ИПУ РАН, 2002. — 60 с.

[10] *Беляков А. Г., Мандель А. С.* Анализ достоверности выводов, формируемых с помощью экспертно-статистических систем. — М.: ИПУ РАН, 2002. — 64 с.

[11] *Аркадьев А. Г., Браверман Э. М.* Обучение машины классификации объектов. — М.: Физматлит, 1971. — 200 с.

[12] *Фейс Р.* Модальная логика. — М.: Наука, 1974.

Учёт отношения соседства между признаками при их отборе в задаче обучения распознаванию образов*

Маслакова С. Н., Середин О. С.
svetlana.maslakova@gmail.com, oseredin@yandex.ru
Тула, Тульский государственный университет

В работе предложена схема отбора подмножеств признаков с учётом отношения их соседства при обучении распознаванию образов. Процедура комбинирует в себе отбор признаков за счёт введения весовых коэффициентов, характеризующих степень информативности соответствующего признака, и учёта априорной информации о взаимосвязи признаков в виде квадратичного штрафа на разность соседних весовых коэффициентов.

Taking into account the neighbor relations among features in procedure of their selection in pattern recognition*

Maslakova S. N., Seredin O. S.
Tula State University, Tula, Russia

The method of interrelated feature subsets selection in the task of pattern recognition is proposed. The procedure combines the selection of features by introducing weight coefficients which characterize degree of informativeness of the features, and using a priori information about their relationship in the form of quadratic penalty on the difference between neighboring weight coefficient.

Проблема решения задачи обучения распознаванию образов в случае большого числа признаков (по сравнению с количеством объектов в обучающей выборке, так называемая ситуация «проклятия размерности»), как правило, сводится к паре стандартных подходов — сокращению размерности за счет отбора наиболее информативных признаков и наложению на решающее правило априорных ограничений (регуляризация решающего правила распознавания). В работах [1, 2, 3] был предложен способ, комбинирующий эти две методики и заключающийся в отборе подмножеств упорядоченных признаков. Однако в этих работах рассматривался только случай одномерной упорядоченности признаков, тогда как упорядоченность признаков характерна для задач распознавания не только сигналов, но и изображений. В работе [4] был разработан метод регуляризации в распознавании изображений отбором информативной подобласти, путем наложения штрафов на различие коэффициентов разделяющей гиперплоскости. В этой работе будет рассмотрен отбор подмножеств взаимосвязанных признаков, путем наложения штрафа на различие информативных весов с учетом их произвольного соседства.

Регуляризация обучения отбором информативной подобласти в признаковом пространстве

Разработку метода регуляризации обучения с учетом наличия структурных отношений между признаками, как и ранее, будем проводить путем введения дополнительных штрафных членов в хорошо известный метод опорных векторов [5]:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} a_i^2 + C\sum\limits_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\boldsymbol{a}, b, \boldsymbol{\delta}), \\ g_j\left(\sum\limits_{i=1}^{n} a_i x_{ij} + b\right) \geqslant 1 - \delta_j, \\ \delta_j \geqslant 0, \quad j = 1, \ldots, N. \end{cases} \tag{1}$$

Здесь используются следующие обозначения: обучающая выборка $(\boldsymbol{x}_j, g_j)$, $j = 1, \ldots, N$, где $\boldsymbol{x} = \{x_i,\ i = 1, \ldots, n\} \in \mathbb{R}^n$ — действительнозначный вектор признаков объекта распознавания, $g_j \in \{-1, +1\}$ — индекс классификации каждого объекта; C — неотрицательный параметр метода и $\boldsymbol{\delta} = \{\delta_j \geqslant 0,\ j = 1, \ldots, N\}$ — вспомогательные переменные метода опорных векторов, обслуживают ситуацию линейно неразделимых подвыборок двух классов; $\boldsymbol{a} = \{a_i,\ i = 1, \ldots, n\} \in \mathbb{R}^n$ — направляющий вектор оптимальной разделяющей гиперплоскости и $b \in \mathbb{R}$ её смещение.

Обычно задачу (1) решают в двойственной форме как задачу квадратичного программирования относительно неотрицательных множителей Лагранжа $\boldsymbol{\lambda} = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_N\}$:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{N}\lambda_i - \dfrac{1}{2}\sum\limits_{j=1}^{N}\sum\limits_{k=1}^{N}\left(g_j g_k \sum\limits_{i=1}^{n} x_{ij}x_{ik}\right)\lambda_j\lambda_k \to \\ \quad \to \max(\boldsymbol{\lambda}), \\ \sum\limits_{l=1}^{N}\lambda_j g_j = 0, \ \ 0 \leqslant \lambda_j \leqslant C/2, \ \ j = 1, \ \ldots, \ N, \end{cases} \tag{2}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №09-07-00394.

Связь коэффициентов направляющего вектора разделяющей гиперплоскости с множителями Лагранжа двойственной задачи определяется следующим образом:

$$a_i = \sum_{j:\ \lambda_j > 0} g_j \lambda_j x_{ij}, \quad i = 1, \ldots, n. \tag{3}$$

Идея регуляризации, предлагаемая в данной работе, заключается в учете при обучении того факта, что конкретный коэффициент разделяющей гиперплоскости соответствует некоторому признаку. Если пара признаков (например, соседние отсчеты в сигнале или соседние точки растра изображения) близки, то не должны сильно отличаться и коэффициенты разделяющей гиперплоскости. Тем самым из всего множества решающих правил, безошибочно разделяющих обучающую выборку, мы выбираем лишь подмножество, удовлетворяющее некоторому априорному ограничению. Комбинированный критерий, заключающийся в отборе информативной подобласти признакового пространства с учетом априорной информации о близости признаков, будет иметь следующий вид:

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{r_i}\left(a_i^2 + \frac{1}{\mu}\right) + \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{\mu} + 1 + \mu\right)\ln r_i + \\ \qquad \displaystyle +\alpha \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} p_{ik}\frac{(r_i - r_k)^2}{r_i r_k} + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \\ \qquad \to \min(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{a}, b, \boldsymbol{\delta}), \\ g_j\left(\displaystyle\sum_{i=1}^{n} a_i x_{ij} + b\right) \geqslant 1 - \delta_j, \\ \qquad \delta_j \geqslant 0, \ \ j = 1, \ldots, N. \end{cases} \tag{4}$$

Здесь μ — неотрицательный параметр селективности [6], $\boldsymbol{r} = \{r_i \geqslant 0,\ i = 1, \ldots, n\}$ — неотрицательные веса при каждой компоненте направляющего вектора искомой разделяющей гиперплоскости и $\boldsymbol{P} = (p_{ik})$ — матрица размера $n \times n$, отвечающая за гладкость решающего правила и отражающая близость признаков: $p_{ik} \geqslant 0$ — двухместная неотрицательная функция близости между признаками.

Так, матрица $\boldsymbol{P}$ для рассмотренного в работе [2] случая признаков, упорядоченных на оси, примет следующий вид:

$$\boldsymbol{P}_{n\times n} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

В случае, когда объект представлен изображением и каждый признак ассоциирован с элементом

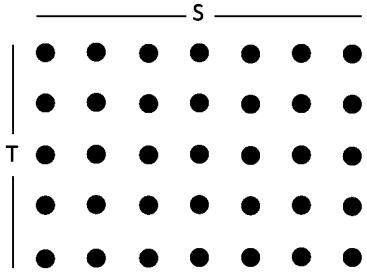


Рис. 1. Растровая решетка размера $T \times S$.

растровой решетки размера $T \times S$ (рис. 1), функция близости может выглядеть следующим образом:

$$p_{ts,\,t's'} = \begin{cases} 1, & d_{ts,\,t's'} \leqslant \sqrt{2}, \\ 0, & d_{ts,\,t's'} > \sqrt{2}, \end{cases} \tag{5}$$

или:

$$p_{ts,\,t's'} = \begin{cases} 1, & d_{ts,\,t's'} \leqslant 1, \\ 0, & d_{ts,\,t's'} > 1, \end{cases} \tag{6}$$

где $t = 1, \ldots, T$, $s = 1, \ldots, S$, $t' = 1, \ldots, T$, $s' = 1, \ldots, S$, а $d_{ts,\,t's'}$ — функция расстояния между элементами растровой решетки, определяющаяся по следующей формуле:

$$d_{ts,\,t's'} = \sqrt{(t - t')^2 + (s - s')^2} \geqslant 0.$$

Матрица $\boldsymbol{P}$ для изображений с использованием функции близости (6) примет блочный вид и будет выглядеть следующим образом:

$$\boldsymbol{P}_{TS\times TS} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{M}_1 & \boldsymbol{E} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \ldots & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{E} & \boldsymbol{M}_2 & \boldsymbol{E} & \boldsymbol{0} & \ldots & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{E} & \boldsymbol{M}_3 & \boldsymbol{E} & \ldots & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{E} & \boldsymbol{M}_4 & \ldots & \boldsymbol{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \ldots & \boldsymbol{M}_T \end{pmatrix},$$

где $\boldsymbol{M}_i$, $i = 1, \ldots, T$ — матрицы размера $S \times S$, имеющие следующий вид:

$$\boldsymbol{M}_{i(S\times S)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

$\boldsymbol{E}$ — единичная матрица размера $S \times S$:

$$\boldsymbol{E}_{S\times S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix},$$

$\mathbf{0}$ — нулевая матрица размера $S\times S$:

$$\mathbf{0}_{S\times S}=\begin{pmatrix}0&0&\dots&0\\0&0&\dots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\0&0&\dots&0\end{pmatrix}.$$

Численная реализация метода отбора информативной подобласти в признаковом пространстве

Приведем численное решение критерия (4). Для краткости введем следующие обозначения:

$$c_i=a_i^2+\frac{1}{\mu},\quad d=\frac{1}{\mu}+1+\mu.$$

Тогда критерии (4) примет следующий вид:

$$\begin{cases}\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\frac{c_i}{r_i}+d\sum_{i=1}^{n}\ln r_i+\alpha\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}p_{ik}\frac{(r_i-r_k)^2}{r_ir_k}+\\ \quad\displaystyle+C\sum_{j=1}^{N}\delta_j\to\min(\boldsymbol{r},\boldsymbol{a},b,\boldsymbol{\delta}),\\ \displaystyle g_j\left(\sum_{i=1}^{n}a_ix_{ij}+b\right)\geqslant 1-\delta_j,\\ \delta_j\geqslant 0,\ \ j=1,\dots,N.\end{cases}\tag{7}$$

Предлагается решать задачу минимизации критерия (7) методом Гауса-Зайделя, разделив переменные на две группы: $(\boldsymbol{a},b,\boldsymbol{\delta})$ и $(\boldsymbol{r})$. Будем проводить оптимизацию по одной группе переменных, зафиксировав вторую.

При фиксированных коэффициентах $r_i,\ i=1,\dots,n$, задача фактически сводится к классической постановке задачи обучения распознаванию образов методом опорных векторов. Двойственный критерий относительно неотрицательных множителей Лагранжа $\lambda_j,\ j=1,\dots,N$ такой задачи, почти совпадает с критерием метода опорных векторов (2):

$$\begin{cases}\displaystyle\sum_{j=1}^{N}\lambda_j-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\left(g_jg_k\sum_{i=1}^{n}r_ix_{ij}x_{ik}\right)\lambda_j\lambda_k\\ \quad\to\max(\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\delta}),\ r_i\geqslant 0,\ i=1,\dots,n,\\ \displaystyle\sum_{j=1}^{N}g_j\lambda_j=0,\ \ 0\leqslant\lambda_j\leqslant\frac{C}{2},\ j=1,\dots,N.\end{cases}\tag{8}$$

Отличие последнего критерия (8) от классической постановки (2) заключается в наличии дополнительных коэффициентов $r_i,\ i=1,\dots,n$ при вычислении матрицы квадратичной формы. Ограничения остаются неизменными, а коэффициенты направляющего вектора разделяющей гиперплоскости вычисляются по правилу:

$$a_i=r_i\sum_{j=1}^{N}g_j\lambda_jx_{ij},\ i=1,\dots,n.\tag{9}$$

Оптимизация по $(\boldsymbol{r})$ при фиксированных $(\boldsymbol{a},b,\boldsymbol{\delta})$ приводит к следующей задаче:

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{c_i}{r_i}+d\sum_{i=1}^{n}\ln r_i+\\ +\alpha\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}p_{ik}\frac{(r_i-r_k)^2}{r_ir_k}\to\min(\boldsymbol{r}).\tag{10}$$

Поиск минимума (10) сводится к решению системы нелинейных уравнений относительно параметров $r_i,\ i=1,\dots,n$:

$$\begin{cases}\displaystyle-\frac{c_1}{r_1}+d+\alpha\sum_{k=1}^{n}(p_{1k}+p_{k1})\left(\frac{r_1}{r_k}-\frac{r_k}{r_1}\right)=0,\\ \dots\\ \displaystyle-\frac{c_n}{r_n}+d+\alpha\sum_{k=1}^{n}(p_{nk}+p_{kn})\left(\frac{r_n}{r_k}-\frac{r_k}{r_n}\right)=0.\end{cases}\tag{11}$$

Решение системы уравнений (11) можно найти с помощью метода простых итераций.

Экспериментальные исследования

Для проверки предложенной схемы отбора групп взаимосвязанных признаков был проведен следующий модельный эксперимент. Два класса изображений размером 20×20 пикселей распределены вокруг своих центров (рис. 2). Преимущественно значения компонент центров равны 130. Центр первого класса содержит небольшой фрагмент размером 4×4 пикселя, значения пикселей внутри фрагмента равны 150. Центр второго класса содержит небольшой фрагмент размером 4×4 пикселя, значения пикселей внутри фрагмента равны 110.

Рис. 2. Центры первого и второго классов.

Объекты «генеральной совокупности» были сгенерированы из соответствующих центров путем добавления шума, распределенного по равномерному закону (нулевое среднее и отклонение в диапазоне $-80,+80$), рис. 3. Общее число объектов «генеральной совокупности» составляло 6000 (по 3000 в каждом классе). Случайным образом было отобрано 100 обучающих выборок, содержащих по 30 объектов каждого класса. Оставшиеся объекты использовались в качестве контрольной выборки.

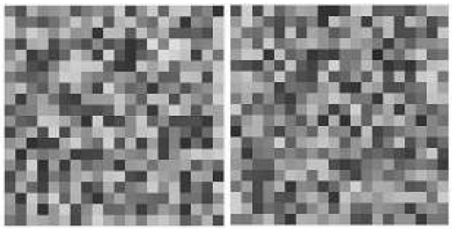


Рис. 3. Пример объектов первого и второго классов.

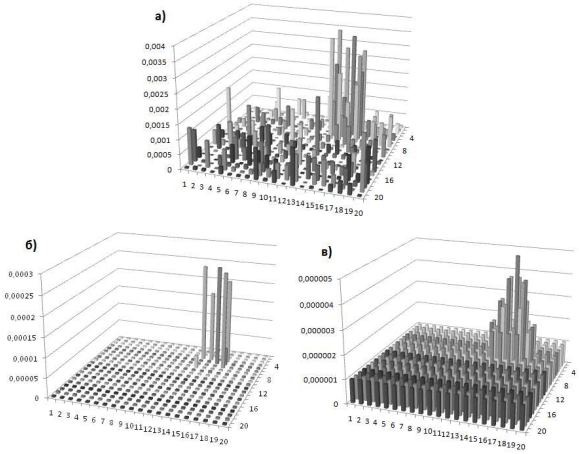


Рис. 4. Распределение весов признаков: а) SVM; б) SVM с отбором признаков; в) SVM с отбором групп взаимосвязанных признаков с квадратичным штрафом на несогласованность.

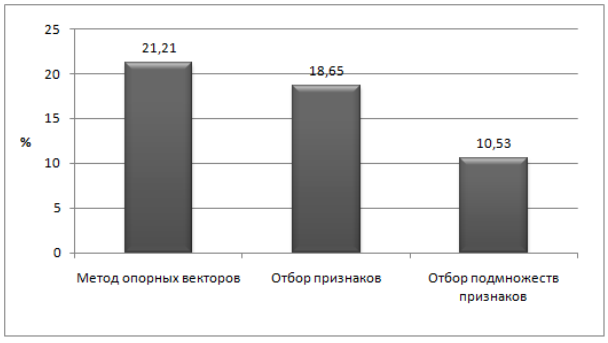


Рис. 5. Усредненный уровень ошибки распознавания объектов (в процентах).

На рисунке 4 приведены примеры распределения значений весов метода опорных векторов, чистого отбора признаков и отбора групп признаков с учетом квадратичного штрафа на значения взаимосвязанных признаков.

Результаты экспериментов, выраженные в виде усредненного уровня ошибки на тестовой выборке, представлены на рисунке 5.

Выводы

В статье предложен новый способ преодоления проблемы малой обучающей выборки. Основная идея предложенного подхода заключается в формализации учета априорной информации о структурных отношениях признаков. Так для сигналов и изображений характерны одномерная и двумерная упорядоченности признаков соответственно. Выписан критерий отбора информативной подобласти признакового пространства с учетом отношения соседства между признаками, предложена схема его численной оптимизации и проведен численный эксперимент. В работе был исследован только квадратичный штраф на разность весовых коэффициентов. Однако ранее было показано, что такое штрафование «размывает» информативную подобласть в пространстве взаимосвязанных признаков в случае их одномерной упорядоченности. В дальнейшем будут проводиться исследования функции модуля в качестве штрафа на различие весовых коэффициентов.

Литература

[1] *Копылов А. В., Середин О. С., Приймак А. Ю., Моттль В. В.* Отбор подмножеств взаимосвязанных признаков на основе параметрической процедуры динамического программирования // Всеросс. конф. ММРО-14, М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 136–140.

[2] *Середин О. С., Моттль В. В.* Отбор информативных признаков при обучении распознаванию образов с упорядоченными признаками // Таврический вестник информатики и математики, 2008, № 2. — С. 180–185.

[3] *Seredin O., Kopylov A., Mottl V.* Selection of Subsets of Ordered Features in Machine Learning // Transactions on Machine Learning and Data Mining, Vol. 2, No. 2, 2009. — P. 65–79.

[4] *Seredin O S.* Regularization of Image Recognition: Relevance Regions Selection // Proceedings of 8th International Conference «Pattern Recognition and Image analysis: New Information Technologies», Vol.1 — Yoshkar-Ola, 2007. — P. 55–61.

[5] *Vapnik V.* Statistical Learning Theory. — New York: Wiley, 1998.

[6] *Tatarchuk A., Mottl V., Eliseyev A., Windridge D.* Selectivity Supervision in Combining Pattern Recognition Modalities by Feature- and Kernel-Selective Support Vector Machines // Proceedings of the 19th International Conference on Pattern Recognition, December 7-11, 2008, Tampa, Florida, USA.

Методы структуризации качественных данных в задаче агрегирования больших экспериментальных графов*

Покровская И. В., Бауман Е. В., Дорофеюк Ю. А.
ivp54@mail.ru
Москва, Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН

Поставлена задача обработки информации с помощью агрегирования больших эмпирических графов; исследованы возможности точного и приближённого представления графа через его описание; проведено компьютерное моделирование разработанных алгоритмов.

The qualitative data structuring methods in large experimental graphs aggregation problem*

Pokrovskaya I. V., Bauman E. V., Dorofeyuk J. A.
Institute of Control Sciences named by V. A. Trapeznikov RAS, Moscow, Russia

The information processing problem, based on the large empirical graphs aggregation, was set; the ability of exact and approximate graph representation through it's description were investigated; the developed algorithms computer modelling was realized.

В работе формально поставлена задача обработки информации с помощью агрегирования больших эмпирических графов; исследованы возможности точного и приближённого представления графа через его описание. Оптимизационный подход к построению размытой классификации распространён на задачу агрегирования. В рамках структурно-классификационной методологии анализа данных [1] разработаны оригинальные алгоритмы решения задачи обработки информации с помощью агрегирования графов.

Агрегирование больших экспериментальных графов

Пусть задан большой экспериментальный граф (далее рассматриваются только ориентированные невзвешенные графы). Задача состоит в выявлении основных пучков дуг в этом графе, то есть в выделении пар подмножеств множества вершин графа, таких, что из первого подмножества во второе идут почти все дуги. Особый интерес представляет случай, когда совокупность всех пучков можно рассматривать как некоторый малый граф, множество вершин которого является набором подмножеств множества вершин исходного графа. Набор подмножеств некоторого множества можно интерпретировать, как кластеризацию с перекрывающимися кластерами. Задача агрегирования исходного графа заключается в нахождении такой кластеризации множества вершин исходного графа и такого малого графа построенного на кластерах, которые в некотором смысле оптимально описывают исходный экспериментальный граф.

Формально задача ставится следующим образом. Обозначим исходный граф через G, множество его вершин — через $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$, а его матрицу смежности — через $\boldsymbol{M}(G) = \|m_{i,j}\|, \quad i = 1, \ldots, n, \; j = 1, \ldots, n$.

Пусть $H = \{H_1, \ldots, H_r\}, \;\; H_i \subseteq X$ — некоторая кластеризация множества X с перекрывающимися кластерами. Такую кластеризацию можно задавать с помощью матрицы $\boldsymbol{B}(H) = \|b_{pi}\|$, элемент b_{pi} которой, находящийся на пересечении p-ой строки и i-го столбца, равен 1, если i-я вершина принадлежит p-му кластеру, и 0 в противном случае:

$$b_{pi} = \begin{cases} 1, & \text{если } x_i \in H_p \\ 0, & \text{если } x_i \notin H_p \end{cases}, \qquad (1)$$

где $i = 1, \ldots, n, \;\; p = 1, \ldots, r$.

Пусть на H, как на множестве вершин, построен малый граф Γ, матрицу смежности которого обозначим через $\boldsymbol{M}(\Gamma) = \|\mu_{i,j}\|, \quad i = 1, \ldots, r, \; j = 1, \ldots, r$. По кластеризации H и графу Γ строится аппроксимирующий граф $G(\Gamma, H)$ с помощью следующего алгоритма.

Алгоритм построения графа $G(\Gamma, H)$. Выбирается дуга графа Γ, пусть она для определённости идёт из вершины H_p в вершину H_q. Затем в графе $G(\Gamma, H)$ проводятся дуги из всех элементов кластера H_p во все элементы кластера H_q. Такая процедура выполняется со всеми дугами графа Γ. Матрица смежности $\boldsymbol{M}(G(\Gamma, H)) = \|\hat{m}_{i,j}\|$ графа $G(\Gamma, H)$ вычисляется по формуле:

$$\boldsymbol{M}(G(\Gamma, H)) = \boldsymbol{B}(H)^{\intercal} * \boldsymbol{M}(\Gamma) * \boldsymbol{B}(H) \qquad (2)$$

В (2) знак «*» означает булево произведение матриц, а элементы b_{pi} матрицы $\boldsymbol{B}(H)$ определяются с помощью (1). Из (2) следует, что элементы матрицы смежности $\boldsymbol{M}(G(\Gamma, H))$ определяются следу-

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты № 08-07-00347, № 10-07-00210-а.

ющим выражением:

$$\hat{m}_{i,j} = \bigvee_{p,q=1}^{r} b_{pi}\mu_{pq}b_{qj}. \qquad (3)$$

Задачи агрегирования

Возможны две постановки задачи агрегирования:

1. Для заданного исходного графа G найти такие граф Γ и соответствующую кластеризацию $H = \{H_1, \ldots, H_r\}$ с минимально возможным числом классов r, чтобы $G = G(\Gamma, H)$. Другими словами это постановка задачи выявления возможности точного представления графа G через граф Γ меньшего размера. Если такой граф существует, то будем его называть сужением графа G, а сужение с минимальным числом вершин будем называть оптимальным сужением графа G.
2. Фиксируем число классов r в кластеризации $H = \{H_1, \ldots, H_r\}$. Для заданного исходного графа G необходимо найти граф Γ и соответствующую кластеризацию H с фиксированным числом классов r, так чтобы граф $G(\Gamma, H)$ был как можно ближе к графу G, то есть, чтобы минимизировался заранее выбранный критерий близости J. Данная постановка реализует аппроксимационный подход к задаче декомпозиции графа G.

Рассмотрим более подробно специфику решения так поставленных задач.

Первая задача агрегирования (оптимального сужения исходного графа). Для заданного исходного графа G найти граф Γ и соответствующую кластеризацию $H = \{H_1, \ldots, H_r\}$ минимального размера такие, чтобы $G = G(\Gamma, H)$.

Если рассматривать эту задачу без каких-либо дополнительных ограничений, то она представляет собой NP-полную задачу.

Ограничим поиск сужений графа G его подграфами. Для этого будем рассматривать пары «граф Γ — кластеризация $H = \{H_1, \ldots, H_r\}$» только следующего специального вида. В каждом кластере H_p выделяется один из элементов x_{i_p} (напомним, что такой элемент — одна из вершин графа G). Далее считается, что на графе Γ дуга из вершины H_p идёт в вершину H_q тогда и только тогда, когда из вершины x_{i_p} идёт дуга в вершину x_{i_q} на графе G. Другими словами, подграф графа G, построенный на множестве вершин $\{x_{i_1}, \ldots, x_{i_r}\}$, изоморфен графу Γ.

Сужения такого типа будем называть внутренними.

Для нахождения оптимального внутреннего сужения графа G построим матрицу $\boldsymbol{D}(G)$, у которой n строк и $2n$ столбцов. Первые n столбцов этой матрицы соответствуют матрице $\boldsymbol{M}(G)$, а последующие n столбцов соответствуют матрице $\boldsymbol{M}^{\intercal}(G)$ — транспонированная матрица $\boldsymbol{M}(G)$. То есть матрица $\boldsymbol{D}(G)$ имеет следующую структуру:

$$\boldsymbol{D}(G) = \big(\boldsymbol{M}(G) \vdots \boldsymbol{M}^{\intercal}(G)\big).$$

Среди строк этой матрицы выделим строки, которые нельзя представить в виде булевой суммы никакого набора других строк этой же матрицы. В содержательном смысле этот набор строк составляет «независимый базис». Пусть $\{x_{i_1}, \ldots, x_{i_r}\}$ — подмножество вершин графа G, соответствующих выделенным строкам.

Теорема 1. *Граф Γ в оптимальном внутреннем сужении графа G — изоморфен подграфу G, построенному на множестве вершин $\{x_{i_1}, \ldots, x_{i_r}\}$.*

Вторая задача агрегирования (аппроксимационный подход к декомпозиции исходного графа). Для заданного исходного графа G найти такие граф Γ и соответствующую кластеризацию $H = \{H_1, \ldots, H_r\}$ с фиксированным числом классов r, чтобы граф $G(\Gamma, H)$ был как можно ближе к графу G в смысле минимизации заранее выбранного критерия J такой близости:

$$J = J\big(G(\Gamma, H)\big) = \big(M(G) - M\big(G(\Gamma, H)\big)\big)^2 = \sum_{i,j=1}^{n} [m_{ij} - \hat{m}_{ij}]^2. \qquad (4)$$

В (4) величины $\hat{m}_{ij}$ определяются с помощью выражения (3).

Алгоритм решения этой задачи состоит из последовательного выполнения двух процедур, которые выполняются на каждом шаге алгоритма:

1. При заданном графе Γ ищется такая кластеризация $H = \{H_1, \ldots, H_r\}$ с заданным числом классов r, которая позволяет уменьшить значение критерия J.
2. При фиксированном числе вершин графа Γ и при заданной кластеризации $H = \{H_1, \ldots, H_r\}$ ищется такое изменение структуры графа Γ, которое уменьшает значение критерия J.

В работе предложены эффективные алгоритмы оптимизации для обеих процедур. Предложенный подход является продвижением идей размытой классификации для анализа больших экспериментальных графов. Отметим, что кластеризация с перекрывающимися классами является важным частным случаем размытой классификации [1].

Компьютерное моделирование

Было проведено компьютерное моделирование алгоритма решения задачи декомпозиции исходного графа (в рамках аппроксимационного подхода)

Таблица 1. Матрица смежности (первая часть).

$\boldsymbol{M}(G)$	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9
x_1	1	1	0	1	0	1	1	1	0
x_2	1	1	1	0	0	1	0	1	0
x_3	1	1	1	1	1	1	1	1	0
x_4	1	1	1	1	0	1	0	0	0
x_5	0	1	1	1	1	1	0	0	1
x_6	1	0	0	0	1	1	1	1	1
x_7	1	1	0	1	0	0	1	1	1
x_8	1	1	0	0	0	0	1	1	1
x_9	1	0	0	0	0	0	1	1	1
x_{10}	0	1	1	0	0	1	0	0	1
x_{11}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
x_{12}	0	1	1	0	0	1	1	1	1
x_{13}	1	0	1	1	1	1	0	1	0
x_{14}	0	1	0	0	0	1	1	1	0
x_{15}	0	1	1	0	0	0	0	0	1
x_{16}	0	0	1	1	0	1	0	0	0
x_{17}	1	1	0	0	0	1	0	1	1
x_{18}	1	1	0	1	0	1	0	0	1

Матрица смежности (вторая часть).

$\boldsymbol{M}(G)$	x_{10}	x_{11}	x_{12}	x_{13}	x_{14}	x_{15}	x_{16}	x_{17}	x_{18}
x_1	0	0	0	0	0	0	0	1	1
x_2	0	0	1	0	1	1	0	1	0
x_3	1	0	1	0	0	0	0	1	1
x_4	1	0	0	0	0	0	1	1	1
x_5	0	0	0	0	1	0	0	0	0
x_6	0	0	1	1	0	0	0	1	1
x_7	0	0	1	0	1	0	1	0	0
x_8	0	0	0	0	0	1	1	0	0
x_9	0	0	0	0	0	1	0	1	1
x_{10}	1	0	0	1	0	0	0	1	1
x_{11}	0	1	0	0	1	1	1	0	0
x_{12}	0	1	1	0	1	0	1	1	0
x_{13}	1	0	1	1	0	0	0	0	1
x_{14}	0	1	1	0	1	1	1	0	0
x_{15}	0	1	0	0	1	1	0	0	0
x_{16}	0	1	1	0	1	1	1	1	0
x_{17}	0	0	0	0	0	0	1	1	1
x_{18}	0	0	0	1	0	0	0	1	1

на модельном материале. В качестве исходного материала была рассмотрена группа детей (18 человек) одного из детских садов г. Москвы. Каждого ребёнка попросили ответить на вопрос: «С кем из детей из предъявленного списка он хочет играть?». В результате был получен исходный ориентированный граф с матрицей смежности, приведенной в таблице 1.

Затем с помощью описанного выше алгоритма находились малый граф Γ и соответствующая кластеризация H на два класса (то есть аппроксимирующий граф Γ состоял из двух вершин).

В итоге было получено два следующих результата:

1. граф Γ_1 состоит из двух несвязанных вершин с петлями. Это означает, что есть два основных класса детей, желающих играть с детьми из «своего» класса (отметим, что классы — пересекающиеся). Этот результат отражён в таблице 2.
2. в графе Γ_2 есть петли у обеих вершин, и из второй вершины идёт дуга в первую. Это означает, что дети хотят играть с детьми из «своего» класса, но, кроме того, все дети из второго класса хотят играть со всеми детьми из первого класса. Данный результат даёт более детальную картину взаимоотношений между детьми. Этот результат отражён в таблице 3.

Таблица 2.

$\boldsymbol{M}(\Gamma_1)$	H_1	H_2	Кластеризация
H_1	1	0	$H_1 = \{x_2, x_7, x_{11}, x_{12}, x_{14}, x_{15}, x_{16}\}$
H_2	0	1	$H_2 = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_6 x_7, x_8, x_9, x_{17}, x_{18}\}$

Таблица 3.

$\boldsymbol{M}(\Gamma_2)$	H_1	H_2	Кластеризация
H_1	1	0	$H_1 = \{x_1, x_2, x_6, x_7, x_8, x_9, x_{17}, x_{18}\}$
H_2	1	1	$H_2 = \{x_2, x_3, x_4, x_7 x_{12}, x_{14}, x_{18}\}$

Литература

[1] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Классификационный анализ данных // «Избранные труды Международной конференции по проблемам управления. Том 1», Москва: СИНТЕГ, 1999.

Метод нейтральной точки для компенсации пропусков в обучающей совокупности при обучении распознаванию образов по методу опорных векторов*

Панов М. Е., Татарчук А. И., Моттль В. В.
panov.maxim@gmail.com, aitech@ya.ru, vmottl@ya.ru
Москва, Вычислительный центр РАН; Московский физико-технический институт

В задачах распознавания образов часто встречается проблема пропущенных значений признаков в обучающей совокупности. В результате мы не можем использовать объекты с пропущенными значениями признаков для обучения методами, работающими в пространстве всех признаков (например, метод опорных векторов). В данной работе предлагается использовать метод нейтральной точки для восполнения пропущенных значений признаков. Это позволяет использовать для обучения методом опорных векторов все объекты из обучающей совокупности. Эксперименты, проведенные на биометрической базе данных Biosecure DS2, показывают, что метод нейтральной точки позволяет улучшить обобщающую способность метода опорных векторов по сравнению с обучением по неполной совокупности объектов.

The neutral point substitution method for addressing missing values in pattern recognition by support vector machines*

Panov M. E., Tatarchuk A. I., Mottl V. V.
Computing Center of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia; Moscow Institute of Physics and Technology

In pattern-recognition it is common to encounter missing feature values in the training set. As a result, objects with missing feature values couldn't be used by methods working in joint feature space(e. g. support vector machine). In this paper missing values are filled by the neutral point substitution method(NPS). Thus, all the objects in the training set can be used by support vector machine. Experiments based on the publicly available Biosecure DS2 data set show that the SVM-NPS approach achieves very good generalization performance compared to the SVM working with incomplete training set.

Введение

На данный момент в литературе по распознаванию образов проблема пропущенных значений признаков решается тремя способами:

— замена пропущенных значений признаков средними значениями [2, 3] или через более сложные методы [4], которые учитывают особенности распределений вероятностей;
— построение классификаторов по всевозможным комбинациям признаков [2];
— построение классификаторов, основанных на предположении о независимости признаков (наивный Байес) [1].

Ни один из этих подходов не является полностью удовлетворительным. Замена неизвестных признаков их математическими ожиданиями потенциально может сыграть в пользу одного из классов. Построение классификаторов по всевозможным комбинациям признаков требует экспоненциального по числу признаков количества классификаторов, а значит этот подход не является масштабируемым. Наивный Байес не учитывает вероятностную зависимость признаков, которая наблюдается в большинстве реальных задач.

В данной работе предлагается заменять пропущенные значения признаков с помощью метода нейтральной точки, изначально предложенного в [5] для случая разделенной обучающей совокупности, состоящей из непересекающихся подмножеств объектов, в пределах каждого из которых известны значения только одного признака. Идея метода заключается в замещении пропущенных измерений некоторого признака такими его значениями, которые не смещают решающее правило в процессе обучения в сторону одного из классов. В [5] показано, что в случае разделенной обучающей совокупности метод нейтральной точки теоретически эквивалентен методу комбинирования классификаторов, известному в литературе как Sum Rule [7].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-07-09291.

Метод опорных векторов для одного признака

Пусть на множестве объектов реального мира $\omega \in \Omega$ определена совокупность признаков, принимающих значения в некоторых шкалах $x_i(\omega)\colon \Omega \to \mathbb{X}_i,\ i = 1, \ldots, n$, в каждой из которых определена потенциальная функция $K_i\left(x_i', x_i''\right)$. Потенциальной функцией называется симметричная функция двух аргументов $\mathbb{X}_i \times \mathbb{X}_i \to \mathbb{R}$, образующая неотрицательно определенную матрицу $\left[K_i\left(x_i(\omega_j), x_i(\omega_l)\right);\ j, l = 1, \ldots, m\right]$ для любого конечного множества объектов. Всякая потенциальная функция $K_i\left(x_i', x_i''\right)$ погружает множество $\mathbb{X}_i$ в некоторое действительное линейное пространство со скалярным произведением $\mathbb{X}_i \subseteq \tilde{\mathbb{X}}_i$, в котором

нулевой элемент $\phi_i \in \tilde{\mathbb{X}}_i$ и линейные операции $x'_i + x''_i \colon \tilde{\mathbb{X}}_i \times \tilde{\mathbb{X}}_i \to \tilde{\mathbb{X}}_i$ и $cx_i \colon \mathbb{R} \times \tilde{\mathbb{X}}_i \to \tilde{\mathbb{X}}_i$ определены некоторым специальным образом [8]. Роль скалярного произведения играет сама исходная потенциальная функция.

Одним из наиболее популярных методов обучения по прецедентам является метод опорных векторов, предложенный В. Н. Вапником [6] и известный в англоязычной литературе под названием SVM (Support Vector Machine).

Пусть $\Omega^* = \{\omega_j, j = 1, \ldots, N\}$ — обучающая совокупность, в которой для каждого объекта ω_j известен индекс его принадлежности к одному из двух классов $y_j = 1$ или $y_j = -1$ и значения признаков из подмножества $I_j \subset I = \{1, \ldots, n\}$, в то время как значения признаков из дополнительного множества $\bar{I}_j = I \setminus I_j$ остаются неизвестными. Таким образом, $I_j \cup \bar{I}_j = I = \{1, \ldots, n\}$, $I_j \cap \bar{I}_j = \varnothing$. Мы будем использовать также символ $\Omega_i^* \subseteq \Omega^*$ для обозначения множества объектов обучающей совокупности, для которых известно значение i-го признака.

Главной идеей метода опорных векторов является построение оптимальной разделяющей гиперплоскости в линейном пространстве $\tilde{\mathbb{X}}_i$, порождаемой потенциальной функцией: $\hat{f}\big(x_i(\omega)\big) = K_i\big(a_i, x_i(\omega)\big) + b_i \gtrless 0$. Оптимальная разделяющая гиперплоскость задается элементом линейного пространства $a_i \in \tilde{\mathbb{X}}_i$ и сдвигом $b_i \in \mathbb{R}$. Критерий обучения методом опорных векторов по i-му признаку имеет вид

$$\begin{cases} K_i(a_i, a_i) + C \sum\limits_{\omega_j \in \Omega_i^*} \delta_j \to \min\{a_i, b_i, \delta_j\}; \\ y_j\big(K_i\big(a_i, x_i(\omega_j)\big) + b_i\big) \geqslant 1 - \delta_j, \\ \delta_j \geqslant 0, \quad \omega_j \in \Omega_i^*; \end{cases} \tag{1}$$

Пусть в результате решения данной задачи оптимизации найдена оптимальная разделяющая гиперплоскость в линейном пространстве $\tilde{\mathbb{X}}_i$ значений i-го признака. Параметрами оптимальной разделяющей гиперплоскости являются направляющий вектор $\hat{a}_i \in \tilde{\mathbb{X}}_i$ и сдвиг $\hat{b}_i \in \mathbb{R}$. Будем называть точки линейного пространства $\tilde{\mathbb{X}}_i$, лежащие на этой гиперплоскости, нейтральными точками линейного пространства значений i-го признака относительно обучающей совокупности и обозначать специальным символом $\hat{x}_{\phi,i}$:

$$\hat{x}_{\phi,i} \in \tilde{\mathbb{X}}_{\phi,i}, \quad \tilde{\mathbb{X}}_{\phi,i} = \big\{x_i \in \tilde{\mathbb{X}}_i \colon K_i(\hat{a}_i, x_i) + \hat{b}_i = 0\big\}.$$

Очевидно, что в общем случае для каждого признака $i = 1, \ldots, n$ существует континуум нейтральных точек, из которых в данной работе предлагается выбирать точку минимальной нормы $\hat{x}_{\phi,i} = h_i \hat{a}_i$. Коэффициент h_i легко находится из условия

$$K_i(\hat{a}_i, h_i\hat{a}_i) + \hat{b}_i = h_i K_i(\hat{a}_i, \hat{a}_i) + \hat{b}_i = 0.$$

Отсюда следует, что

$$h_i = -\frac{\hat{b}_i}{K_i(\hat{a}_i, \hat{a}_i)}, \quad \hat{x}_{\phi,i} = h_i\hat{a}_i = -\frac{\hat{b}_i}{K_i(\hat{a}_i, \hat{a}_i)}\hat{a}_i.$$

Метод опорных векторов в пространстве всех признаков

Для обобщения метода опорных векторов на декартово произведение линейных пространств отдельных признаков $\tilde{\mathbb{X}} = \tilde{\mathbb{X}}_1 \times \ldots \times \tilde{\mathbb{X}}_n$ необходимо построить потенциальную функцию $K(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'')$, $\boldsymbol{x} = (x_i)_{i=1}^n \in \tilde{\mathbb{X}}$. Заметим, что сумма потенциальных функций для отдельных признаков $K(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'') = \sum_{i=1}^n K_i(x'_i, x''_i)$ будет потенциальной функцией в $\tilde{\mathbb{X}}$. С такой точки зрения выбор любой точки $\boldsymbol{a} = \big(a_i \in \tilde{\mathbb{X}}_i\big)_{i=1}^n \in \tilde{\mathbb{X}}$ и действительного числа $b \in \mathbb{R}$ задает разделяющую гиперплоскость с направляющим вектором $\boldsymbol{a}$ в декартовом произведении $\tilde{\mathbb{X}} = \tilde{\mathbb{X}}_1 \times \ldots \times \tilde{\mathbb{X}}_n$:

$$\hat{f}\big(\boldsymbol{x}(\omega)\big) = K\big(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{x}(\omega)\big) + b = \sum_{i=1}^n K_i\big(a_i, x_i(\omega)\big) + b \gtrless 0.$$

Теперь можно напрямую применить принцип обучения по методу опорных векторов к декартову произведению линейных пространств отдельных признаков $\tilde{\mathbb{X}} = \tilde{\mathbb{X}}_1 \times \ldots \times \tilde{\mathbb{X}}_n$. Итоговый критерий обучения запишем в виде, учитывающем неизвестные значения признаков:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^n K_i(a_i, a_i) + C \sum\limits_{j=1}^N \delta_j \to \min\{a_i, b, \delta_j\}; \\ y_j\Big(\sum\limits_{i \in I_j} K_i\big(a_i, x_i(\omega_j)\big) + \sum\limits_{i \in \bar{I}_j} K_i\big(a_i, x_i(\omega_j)\big) + b\Big) \geqslant \\ \qquad \geqslant 1 - \delta_j, \quad \delta_j \geqslant 0, \quad j = 1, \ldots, N. \end{cases} \tag{2}$$

Заметим, что, так как нам неизвестны значения $x_i(\omega_j)$ при $i \in \bar{I}_j$, то задача (2) не может быть решена непосредственно. Однако, т. к. мы имеем решения задач (1) для каждого из признаков, то мы знаем значения соответствующих нейтральных точек $\hat{x}_{\phi,i} \in \tilde{\mathbb{X}}_i$, $i = 1, \ldots, n$. В следующем разделе мы применим нейтральные точки для компенсации пропущенных значений признаков.

Метод нейтральной точки для отдельных признаков

Для каждого объекта ω_j заменим в исходной задаче обучения методом опорных векторов (2) неизвестные фактические значения признаков $x_i(\omega_j)$, $i \in \bar{I}_j$, значением $\hat{x}_{\phi,i} = -\frac{\hat{b}_i}{K_i(\hat{a}_i, \hat{a}_i)}\hat{a}_i$, представляющим собой нейтральную точку линейного пространства значений соответствующего признака:

$$K_i\big(a_i, \hat{x}_{\phi,i}\big) = -\frac{\hat{b}_i}{K_i(\hat{a}_i, \hat{a}_i)} K_i\big(a_i, \hat{a}_i\big).$$

В итоге получаем следующую задачу обучения:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} K_i(a_i,a_i) + C\sum\limits_{j=1}^{N}\delta_j \to \min\{a_i, b, \delta_j\}; \\ y_j\Big(\sum\limits_{i\in I_j} K_i\big(a_i, x_i(\omega_j)\big) - \\ \quad - \sum\limits_{i\in\bar{I}_j} \frac{\hat{b}_i}{K_i(\hat{a}_i,\hat{a}_i)} K_i\big(a_i,\hat{a}_i\big) + b\Big) \geqslant 1-\delta_j, \\ \delta_j \geqslant 0, \quad j=1,\ldots,N. \end{cases} \tag{3}$$

В данной задаче нам уже известны все значения в ограничениях, и мы можем решать ее непосредственно.

В следующем разделе мы распространим идею построения нейтральной точки для одного признака на любое подмножество признаков.

Обобщенный метод нейтральной точки

Рассмотрим произвольное множество признаков $I \subset \{1,\ldots,n\}$ и обозначим через $\Omega_I^* = \cap_{i\in I}\Omega_i^*$ подмножество объектов, для которых известны все признаки из I. Рассмотрим следующую задачу обучения:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i\in I} K_i(a_i,a_i) + C\sum\limits_{\omega_j\in\Omega_I^*}\delta_j \to \min\{a_i, b_I, \delta_j\}; \\ y_j\Big(\sum\limits_{i\in I} K_i\big(a_i, x_i(\omega_j)\big) + b_I\Big) \geqslant 1-\delta_j, \\ \delta_j \geqslant 0, \quad \omega_j \in \Omega_I^*. \end{cases} \tag{4}$$

Пусть решением данной задачи является направляющий вектор $\hat{\boldsymbol{a}}_{\phi,I} = \big(\hat{a}_i^I\big)_{i\in I}$ и сдвиг $\hat{b}_I$. Тогда существует множество нейтральных точек

$$\tilde{\mathbb{X}}_{\phi,I} = \Big\{\boldsymbol{x}_{\phi,I} = \big(x_{\phi,i}^I\big)_{i\in I} \colon \sum_{i\in I} K_i(\hat{a}_i^I, x_{\phi,i}^I) + \hat{b}_I = 0\Big\}.$$

Заметим, что при $|I| = 1$ мы получаем в точности множество нейтральных точек в случае отдельного признака. Аналогично вышеописанному предлагается выбирать из $\tilde{\mathbb{X}}_{\phi,I}$ нейтральную точку минимальной нормы $\hat{\boldsymbol{x}}_{\phi,I} = h_I\hat{\boldsymbol{a}}_{\phi,I}$. Коэффициент h_I легко находится из условия

$$\sum_{i\in I} K_i(\hat{a}_i^I, h_I\hat{a}_i^I) + \hat{b}_I = h_I\sum_{i\in I} K_i(\hat{a}_i^I,\hat{a}_i^I) + \hat{b}_I = 0.$$

Отсюда получаем:

$$h_I = -\frac{\hat{b}_I}{\sum_{i\in I} K_i\big(\hat{a}_i^I,\hat{a}_i^I\big)};$$

$$\hat{\boldsymbol{x}}_{\phi,I} = -\frac{\hat{b}_I}{\sum_{i\in I} K_i\big(\hat{a}_i^I,\hat{a}_i^I\big)}\hat{\boldsymbol{a}}_{\phi,I}.$$

Теперь мы готовы сформулировать новую задачу, подставив в исходную задачу обучения по методу опорных векторов (2) нейтральные точки $\hat{\boldsymbol{x}}_{\phi,\bar{I}_j} = \big(\hat{x}_{\phi,i}^{\bar{I}_j}\big)_{i\in\bar{I}_j}$, полученные для всех $\bar{I}_j$, $j=1,\ldots,N$, вместо неизвестных фактических значений признаков $x_i(\omega_j)$, $i\in\bar{I}_j$:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} K_i(a_i,a_i) + C\sum\limits_{j=1}^{N}\delta_j \to \min\{a_i, b, \delta_j\}; \\ y_j\Big(\sum\limits_{i\in I_j} K_i\big(a_i, x_i(\omega_j)\big) - \\ \quad -\sum\limits_{i\in\bar{I}_j} K_i\Big(a_i, \frac{\hat{b}_{\bar{I}_j}}{\sum\limits_{i\in I} K_i\left(\hat{a}_i^{\bar{I}_j},\hat{a}_i^{\bar{I}_j}\right)}\hat{a}_i^{\bar{I}_j}\Big) + b\Big) \geqslant 1-\delta_j, \\ \delta_j \geqslant 0, \quad j=1,\ldots,N. \end{cases} \tag{5}$$

Преимущество обобщенного метода нейтральной точки над методом нейтральной точки в случае отдельного признака требует экспериментальной проверки. Его недостатком является необходимость в общем случае решать задачи поиска нейтральной точки (4) для всевозможных подмножеств признаков $I \subset \{1,\ldots,n\}$, что является тяжелой задачей с вычислительной точки зрения. Заметим однако, что в реальных задачах зачастую пропуски подчиняются некоторым закономерностям, например, при сборе биометрических данных в некоторой группе у всех людей могут быть получены изображения лиц и радужек глаза, но ни у кого не получены отпечатки пальцев. В таких случаях количество необходимых нейтральных точек уменьшается и вычисления упрощаются.

В следующем разделе мы проведем исследование обобщающей способности метода нейтральной точки на реальных данных.

Эксперимент на реальных данных

Данные, используемые в данной работе, взяты из базы данных Biosecure, европейского проекта, целью которого является объединение междисциплинарных исследовательских усилий в области биометрической идентификации личности. Для целей нашего эксперимента мы выбрали подмножество из 8 биометрических характеристик: изображение лица, 6 пальцев и радужка левого глаза. Всего в базе данных 333 человека. Для каждого человека сделано по 4 измерения каждой биометрической характеристики. Образец, полученный при первом измерении, используется в качестве шаблона. Все остальные образцы, полученные как от данного человека (клиента), так и от других людей (нарушителей), сравниваются с шаблоном для подсчета числовых мер сходства между ними, которые используются в качестве признаков.

Два фактора являются причиной пропущенных значений признаков. Во-первых, в процессе сбора данных от некоторых волонтеров были получены не все данные. Во-вторых, некоторые биометрические изображения были столь низкого качества, что они не могли быть использованы для генерации признаков.

Для построения обучающей выборки в нашем эксперименте были использованы 156 клиентов, каждый из которых представлен двумя образцами каждого из признаков. Из этого множества случайным образом выбирался 31 клиент. Для каждого из клиентов случайным образом выбиралось 10 нарушителей. Примерно четверть всех объектов в обучающей выборке содержали пропущенные значения признаков. Всего были сгенерированы 500 таких обучающих выборок. Для контроля использовалась большая выборка из 20 962 объектов, не содержащая пропусков значений признаков и не пересекающаяся с обучающей выборкой. Качество классификации усреднялось по всем 500 обучающим выборкам.

Целью эксперимента является в первую очередь показать, что объекты с восстановленными значениями признаков позволяют улучшить качество решающего правила по сравнению с обучением, основанном только на объектах с полным набором признаков. Также сравнивалась работа алгоритма нейтральной точки с другими методами заполнения признаков. Таким образом в эксперименте рассматривалась работа метода опорных векторов, обученного на следующих множествах объектов:

— на выборке, из которой удалены объекты с неизвестными признаками(SVM-Full),
— на выборке, в которой пропущенные значения признаков восстановлены методом нейтральной точки для отдельных признаков(SVM-NPS),
— на выборке, в которой пропущенные значения признаков восстановлены обобщенным методом нейтральной точки(SVM-GNPS),
— на выборке, в которой пропущенные значения признаков восстановлены средними по всей обучающей выборке значениями(SVM-OverallMean),
— на выборке, в которой пропущенные значения признаков восстановлены средними по классу значениями(SVM-CCMean),
— на выборке, в которой пропущенные значения признаков восстановлены средними значениями по множеству ближайших соседей для 5, 10, 15, 20 и 25 соседей, из которых наилучший результат был получен для 10 соседей(SVM-Knn).

Во всех экспериментах в качестве потенциальной функции использовалось обычное скалярное произведение точек числовой оси $K(x', x'') = x'x''$. Для полученных решающих правил сравнивалась доля ошибок (в процентах) на контрольной выборке. Результаты эксперимента сведены в таблицу:

SVM-Full	SVM-NPS	SVM-GNPS
2,40	1,11	0,90
SVM-OverallMean	SVM-CCMean	SVM-Knn10
1,70	2,29	1,94

Как видно из таблицы, обе разновидности метода нейтральной точки дают заметный прирост точности классификации 1,29% и 1,5% соответственно по сравнению с обучением только по объектам со всеми известными признаками. Причем оба метода показывают результат лучше, чем простые методы заполнения пропусков. Заметим, что обобщенный метод нейтральной точки показал более высокий результат.

Выводы

В данной работе предложена модификация метода нейтральной точки для отдельных признаков, названная обобщенным методом нейтральной точки. Применение этих методов к реальной задаче идентификации личности показало заметное увеличение качества классификации по сравнению с обучением по неполной совокупности объектов и простыми методами заполнения пропусков. Таким образом можно заключить, что обе модификации метода нейтральной точки имеют высокую обобщающую способность и надежность.

Литература

[1] *Nandakumar K., Jain A. K., and Ross A.* Fusion in multibiometric identification systems: What about the missing data? // In ICB, 2009. — Pp. 743-–752.

[2] *Fatukasi O., Kittler J., and Poh N.* Estimation of missing values in multimodal biometric fusion // In IEEE Conference on Biometrics: Theory, Applications and Systems, Washington, D.C., 2009. — Pp. 1–6.

[3] *Lucas-Cuesta J. M., de Cordoba Herralde R., D'Haro Enriquez L. F.* Applying feature reduction analysis to a pprlm-multiple gaussian language identification system // Articulo en actas de las V Jornadas de Tecnologia del Habla, Bilbao, 2008. — Pp. 29–32.

[4] *Lin T. I., Lee J. C., and Ho H. J.* On fast supervised learning for normal mixture models with missing information // Pattern Recognition. — 2006. — N. 6. — Pp. 1177—1187.

[5] *Windridge D., Mottl V., Tatarchuk A., and Eliseyev A.* The neutral point method for kernel-based combination of disjoint training data in multimodal pattern recognition problem // LNCS. Proc. Multiple Classifier Systems. — 2007. — V. 4472. — Pp. 13–21.

[6] *Vapnik V.* Statistical Learning Theory. — John-Wiley & Sons, Inc, 1998.

[7] *Kittler J., Hatef M., Duin R. P. W., and Matas J.* On Combining Classifiers // IEEE Trans. Pattern Analysis and Machine Intelligence. — 1998. — V. 20, N. 3. — Pp. 226—239.

[8] *Моттль В. В.* Метрические пространства, допускающие введение линейных операций и скалярного произведения // Доклады Российской академии наук. — 2003. — Т. 388, № 3. — С. 1–4.

Метод наименьших углов для логистической регрессии

Скипор К. С., Стрижов В. В.
skiporkonstantin@mail.ru, strijov@ccas.ru
Москва, МФТИ

Предлагается и исследуется алгоритм отбора признаков для решения задач восстановления логистической регрессии. Приводится математическое обоснование предложенного алгоритма. Алгоритм основан на методе наименьших углов для модели линейной регрессии с использованием дополнительной линеаризации функционала качества. Работа алгоритма проиллюстрирована задачей изучения факторов риска ишемических заболеваний сердца.

В работе рассматривается отыскание из множества признаков такого его подмножества, для которого их линейная комбинация наиболее точно описывает данные. В 1966 году Дрейпером был предложен ступенчатый алгоритм выбора признаков (Forward Stagewise) [1, 2, 3]. Позднее был предложен алгоритм Forward Selection [4], представляющий собой модифицированную версию Forward Stagewise. В 1970 году Хоэрл и Кеннард предложили метод гребневой регрессии (Ridge Regression) [5], в котором использовалась регуляризация — дополнительное ограничение [6] на задачу отбора признаков. Еще один метод регуляризации, Лассо (The Lasso), был предложен Тибширани в 1996 году [7]. В нем вводится ограничение на L_1-норму вектора параметров модели. В модели логистической регрессии этот метод также называется L_1-regularized Logistic Regression [2]. В 2002 году Эфрон, Хасти, Джонстон и Тибширани предложили метод наименьших углов (Least Angle Regression) [8]. Предложенный ими алгоритм LARS для линейных моделей заключается в последовательном добавлении признаков. На каждом шаге признак выбирается таким образом, что вектор регрессионных остатков равноуголен уже добавленным в модель признакам [9]. В 2004 году Мадиган и Ридгевэй предложили идею применения данного метода при использовании линеаризации для обобщенных линейных моделей, в частности, для модели логистической регрессии [10]. Реализация этой идеи лежит в основе данной работы.

Постановка задачи отбора признаков

Дана выборка $D = \{(\boldsymbol{x}^i, y^i)\}_{i=1}^m$, в которой i-й объект описывается строкой из n числовых признаков, $\boldsymbol{x}^i = (x_j^i)_{j=1}^n \in \mathbb{R}^n$ и метки класса $y^i \in \{0, 1\}$. Верхний индекс i указывает порядковый номер объекта выборки, нижний индекс j — порядковый номер признака. Векторы признаков $\boldsymbol{x}_j = (x_j^1, \ldots, x_j^m)^\intercal$ являются линейно независимыми свободными переменными, а вектор $\boldsymbol{y} = (y^1, \ldots, y^m)^\intercal$ является зависимой переменной. Предполагается, что y^i имеет распределение Бернулли. Без ограничения общности будем считать, что признаки $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ стандартизованы

$$\|\boldsymbol{x}_j\|_1 = \sum_{i=1}^m x_j^i = 0, \quad \|\boldsymbol{x}_j\|_2^2 = \sum_{i=1}^m (x_j^i)^2 = 1. \tag{1}$$

Для удобства описания алгоритма обозначим матрицу признаков $X = (\boldsymbol{x}_1 \ldots \boldsymbol{x}_n)$ и вектор параметров $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \ldots, \beta_n)^\intercal$. Принята модель логистической регрессии, согласно которой

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\sigma}(X, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon, \tag{2}$$

где $\boldsymbol{\sigma}(X, \boldsymbol{\beta})$ — сигмоидная функция

$$\boldsymbol{\sigma}(X, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{1 + \exp(-X\boldsymbol{\beta})}. \tag{3}$$

Обозначим функцию регрессии

$$\boldsymbol{\mu}(X, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=1}^n \boldsymbol{x}_j \beta_j = X\boldsymbol{\beta}. \tag{4}$$

Критерием качества модели назначен функционал логарифма правдоподобия

$$\ell(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^n \left(y^i \boldsymbol{x}^i \boldsymbol{\beta} - \ln(1 + \exp(\boldsymbol{x}^i \boldsymbol{\beta})) \right). \tag{5}$$

Требуется построить такой алгоритм последовательного добавления признаков, который на каждом шаге определяет набор признаков с множеством индексов $\mathcal{A}$ и соответствующий набору ненулевой вектор параметров $\boldsymbol{\beta}_{\mathcal{A}}$, такой, что $\boldsymbol{\beta}_{\mathcal{A}^c} = \mathbf{0}$, $\mathcal{A} \sqcup \mathcal{A}^c = \{1, \ldots, n\}$, который доставляет максимум приращению логарифма правдоподобия ℓ при условии, что скорость роста функционала ℓ по любому признаку из набора не меньше скорости роста по всем остальным признакам.

Описание алгоритма

Алгоритм LALR. В настоящей работе предлагается новый алгоритм выбора признаков при восстановлении логистической регрессии — «Least Angle Logistic Regression (LALR)». Принята модель логистической регрессии (2), (3). Обозначим множество индексов $\mathcal{J} = \{1, \ldots, n\}$. Для некоторого

подмножества индексов $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{J}$, назовем его *активным множеством*, определим матрицу *активных признаков*

$$X_{\mathcal{A}} = (\cdots\ s_j \boldsymbol{x}_j\ \cdots)_{j\in\mathcal{A}}, \tag{6}$$

где s_j, назовем его *знаком корреляции*, принимает значения ± 1. Определим также матрицы разностей и сумм между активными признаками и некоторым фиксированным неактивным признаком $\boldsymbol{x}_d$, где $d \in \mathcal{A}^c$, в разбиении $\mathcal{A} \sqcup \mathcal{A}^c = \mathcal{J}$,

$$\begin{aligned} M_{d-} &= (\ \cdots\ \ s_j\boldsymbol{x}_j - s_d\boldsymbol{x}_d\ \ \cdots\ )_{j\in\mathcal{A}}, \\ M_{d+} &= (\ \cdots\ \ s_j\boldsymbol{x}_j + s_d\boldsymbol{x}_d\ \ \cdots\ )_{j\in\mathcal{A}}. \end{aligned} \tag{7}$$

Опишем алгоритм последовательного добавления признаков. Начальные значения положим $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$, $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$, $\mathcal{A} = \varnothing$. Рассмотрим некоторый шаг алгоритма. Пусть $\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}}$ есть текущее приближение функции регрессии на этом шаге. Тогда вектор текущих корреляций между признаками и вектором регрессионных остатков $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}})$ имеет вид:

$$\boldsymbol{c} = X^{\intercal}\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}})\right). \tag{8}$$

Примем знак корреляции

$$s_j = \operatorname{sign}(c_j), \qquad j \in \mathcal{J}. \tag{9}$$

Вычисляем матрицы $X_{\mathcal{A}}$, M_{d-} и M_{d-}, согласно (6) и (7), для $d \in \mathcal{A}^c$. Обозначим $m \times m$-диагональную матрицу W с элементами

$$W_{ii} = \sigma_i(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}})(1 - \sigma_i(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}})).$$

Также обозначим матрицы A_{d-}, A_{d+} и векторы $\boldsymbol{b}_{d-}$, $\boldsymbol{b}_{d+}$

$$A_{d\pm} = M_{d\pm}^{\intercal} W X_{\mathcal{A}}, \tag{10}$$

$$\boldsymbol{b}_{d\pm} = M_{d\pm}^{\intercal}\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}})\right), \tag{11}$$

для всех $d \in \mathcal{A}^c$.

Далее, используя введенные обозначения, вычисляем множество векторов Υ,

$$\Upsilon = \{A_{d-}^{-1}\boldsymbol{b}_{d-}, A_{d+}^{-1}\boldsymbol{b}_{d+}\}_{d\in\mathcal{A}^c}, \tag{12}$$

Алгоритм обновляет текущее приближение функции регрессии $\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}}$ (ниже приводится один вариант), скажем к

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}_+} = \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}} + X_{\mathcal{A}}\boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}}, \tag{13}$$

где оптимальный вектор параметров $\boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}}$ определяется из условия

$$\boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}} = \arg\min_{\boldsymbol{\gamma}\in\Upsilon}{}^{+}\left((\boldsymbol{s}_{\mathcal{A}} \circ \boldsymbol{c}_{\mathcal{A}})^{\intercal}\boldsymbol{\gamma}\right), \tag{14}$$

где $\min^+$ означает, что минимум берется только из положительных значений. Операция «$\circ$» — поэлементное (адамарово) умножение векторов.

Найденное решение $\boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}}$ принадлежит множеству Υ, поэтому для некоторого $d^* \in \mathcal{A}^c$ выполнено либо $\boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}} = A_{d^*-}^{-1}\boldsymbol{b}_{d^*-}$, либо $\boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}} = A_{d^*+}^{-1}\boldsymbol{b}_{d^*+}$. Так определяется оптимальный индекс d^*, соответствующий найденному решению $\boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}}$. В случае, когда $\mathcal{A} = \varnothing$, что соответствует первому шагу, d^* находится из условия максимума абсолютной корреляции:

$$d^* = \arg\max_{d\in\mathcal{J}} |c_d|.$$

Таким образом, определяется индекс d^*, соответствующий оптимальному признаку $\boldsymbol{x}_{d^*}$, и обновляется активное множество индексов, $\mathcal{A}_+ = \mathcal{A} \cup \{d^*\}$. Также обновляется вектор коэффициентов $\boldsymbol{\beta}$, используя (9), $\boldsymbol{\beta}_{\mathcal{A}} = \boldsymbol{\beta}_{\mathcal{A}} + \boldsymbol{s}_{\mathcal{A}} \circ \boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}}$, нижний индекс $\boldsymbol{\beta}_{\mathcal{A}}$ указывает, что изменяются только компоненты, соответствующие активным признакам. Формула (14) дает приближенное значение вектора коэффициентов $\boldsymbol{\gamma}_{\mathcal{A}}$, поэтому алгоритм можно проитерировать для получения точного значения.

На последнем шаге, когда $\mathcal{A} = \mathcal{J}$, все дополнительные условия на скорость роста функционала ℓ выполнены автоматически, оптимальный вектор параметров находится из условия максимизации логарифма правдоподобия ℓ, с помощью итерационного метода наименьших квадратов с перевзвешиванием элементов (IRLS) [11].

Обоснование алгоритма. Пусть имеется некоторое активное множество $\mathcal{A}$ и пусть к тому же известно текущее приближение функции регрессии $\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}}$, (4). Запишем логарифм правдоподобия (5) через функцию регрессии $\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}}$:

$$\ell(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}}) = \sum_{i=1}^{m}\left(y^i\mu_{\mathcal{A}}(\boldsymbol{x}^i) - \ln(1 + \exp(\mu_{\mathcal{A}}(\boldsymbol{x}^i)))\right). \tag{15}$$

Рассмотрим производную логарифма правдоподобия по некоторому вектору $\boldsymbol{x}_j$, обозначим ее c_j:

$$c_j = \frac{d}{d\gamma}\ell(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}} + \boldsymbol{x}_j\gamma)\Big|_{\gamma=0}, \tag{16}$$

откуда, пользуясь (3), в матричном виде получим (8):

$$\boldsymbol{c} = X^{\intercal}\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}})\right).$$

Замечание 1. Вектор $\boldsymbol{c}$ есть вектор текущих корреляций векторов признаков и вектора остатков $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}})$. Поэтому далее под вектором корреляций будем понимать вектор производных по направлению.

Обозначим знак корреляции, как это было сделано в (9). Таким образом, определяем матрицу активных признаков $X_{\mathcal{A}}$, согласно (6). Выразим новое приближение функции регрессии (13) через неизвестные коэффициенты $\boldsymbol{\gamma}$:

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}_+} = \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}} + X_{\mathcal{A}}\boldsymbol{\gamma},$$

Основная цель состоит в поиске оптимального вектора коэффициентов $\boldsymbol{\gamma}$ и активного множества индексов $\mathcal{A}_+$.

Перейдем теперь к формальной интерпретации решаемой задачи. Под скоростью роста функционала по направлению понимается абсолютное значение производной функционала по направлению. Поэтому, решаемая задача заключается в максимизации приращения логарифма правдоподобия (15),

$$\ell(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}_+}) - \ell(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}}) \to \max_{\boldsymbol{\gamma}} \tag{17}$$

при условии, что абсолютная корреляция нового вектора остатков $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}_+})$ на любой активный признак $\boldsymbol{x}_j$, $j \in \mathcal{A}$, не меньше абсолютной корреляции на любой неактивный признак $\boldsymbol{x}_d$, $d \in \mathcal{A}^c$, см. замечание 1. Запишем это условие через производную по направлению (16):

$$\left|\frac{d}{d\alpha}\ell(\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{A}_+} + \boldsymbol{x}_j\alpha)\right|_{\alpha=0} \geqslant \left|\frac{d}{d\alpha}\ell(\boldsymbol{x}_{\mathcal{A}_+} + \boldsymbol{x}_d\alpha)\right|_{\alpha=0}, \tag{18}$$

для любых $j \in \mathcal{A}$ и $d \in \mathcal{A}^c$. Пользуясь обозначениями (10), (11) сформулируем лемму о линеаризации решаемой задачи.

Лемма 1 (о линеаризованном виде). *Задача (17), (18) при линеаризации эквивалентна задаче линейного программирования:*

$$(\boldsymbol{s}_{\mathcal{A}} \circ \boldsymbol{c}_{\mathcal{A}})^{\intercal}\boldsymbol{\gamma} \to \max_{\boldsymbol{\gamma}}$$
$$\begin{cases} A_{d-}\boldsymbol{\gamma} \leqslant \boldsymbol{b}_{d-}, \\ A_{d+}\boldsymbol{\gamma} \leqslant \boldsymbol{b}_{d+}, \\ \forall d \in \mathcal{A}^c. \end{cases} \tag{19}$$

Приведенная ниже теорема 4 позволяет существенно сократить количество опорных точек [12, 13], которые могут являться решением задачи (19). Для доказательства теоремы 4 сформулируем некоторые вспомогательные утверждения.

Лемма 2. *Пусть векторы $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ линейно независимы. Тогда векторы $(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_{k+1}), \ldots, (\boldsymbol{a}_k + \boldsymbol{a}_{k+1})$, $\boldsymbol{a}_{k+1}$ также линейно независимы.*

Определение 1. *Точки $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^n$ называются аффинно зависимыми, если существуют $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$, одновременно ненулевые и такие, что*

$$\sum_{i=1}^{k} \lambda_i \boldsymbol{a}_i = 0, \qquad \sum_{i=1}^{k} \lambda_i = 0.$$

Лемма 3. *Пусть векторы $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1} \in \mathbb{R}^n$ линейно независимы. Обозначим матрицы*

$$A = (\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k), \; A_+ = (\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{a}_{k+1}),$$
$$C = (\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_{k+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_k - \boldsymbol{a}_{k+1}).$$

Матрица $A^{\intercal}C$ имеет полный ранг тогда и только тогда, когда столбцы матрицы $A^{\intercal}A_+$ аффинно независимы.

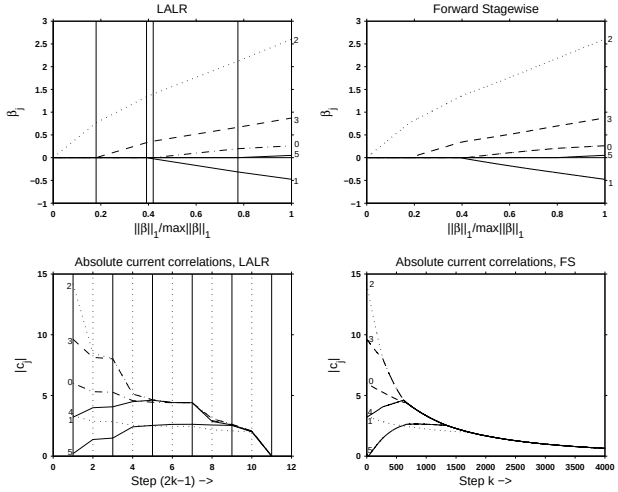


Рис. 1. Сравнение оценок коэффициентов для LALR и Forward Stagewise для модельных данных. Номера кривых соответствуют номерам признаков. Сплошные вертикальные линии обозначают шаги, а штриховые вертикальные — дополнительную итерацию для каждого шага.

Лемма 3 используется при доказательстве существования множества Υ, (12). С помощью следующей теоремы формулируется утверждение о решении задачи линейного программирования (19).

Теорема 4. *Если ЗЛП (19) имеет решение $\boldsymbol{\gamma}^*$, то $\boldsymbol{\gamma}^* \in \Upsilon$, причем*

$$\boldsymbol{\gamma}^* = \arg\min_{\boldsymbol{\gamma} \in \Upsilon}{}^{+}\{(\boldsymbol{s}_{\mathcal{A}} \circ \boldsymbol{c}_{\mathcal{A}})^{\intercal}\boldsymbol{\gamma}\};$$

где $\min^+$ означает, что минимум берется только из положительных значений.

Следствие 1. *На каждом шаге алгоритма абсолютная корреляция текущего вектора остатков на любой активный признак при линеаризации одинакова и больше абсолютной корреляции на любой неактивный признак, т. е. справедливо*

$$\begin{cases} s_i c_i = s_j c_j, & i, j \in \mathcal{A}, \\ s_i c_i > s_d c_d, & i \in \mathcal{A}, d \in \mathcal{A}^c. \end{cases}$$

Следствие 1 представляет собой аналог основного свойства метода наименьших углов в линейных моделях: на каждом шаге вектор остатков лежит на биссекторе для добавленных признаков.

Вычислительные эксперименты

Модельные данные. Сгенерируем $m = 50$ объектов с пятью независимыми, нормально распределенными признаками $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_5$, т. е. $\boldsymbol{x}^i = (x_1^i, \ldots, x_5^i) \sim \mathcal{N}_5(\mathbf{0}, \mathbf{I})$. Примем модель

$$\boldsymbol{y} = \frac{1}{1 + \exp(-(\beta_0 + \boldsymbol{x}_1\beta_1 + \boldsymbol{x}_2\beta_2 + \boldsymbol{x}_3\beta_3))} + \varepsilon.$$

Таблица 1. Результаты работы LALR.

№	1	2	3	4	5	6
0	0	0	0	0,1969	0,2606	9,2868
1	0	0	−0,0250	−0,3142	−0,4733	−21,4689
2	0,7769	1,3359	1,4005	2,1215	2,5999	91,6048
3	0	0,3313	0,3615	0,6677	0,8713	36,5161
4	0	0	0	0	0	−8,2624
5	0	0	0	0	0,0513	1,6560

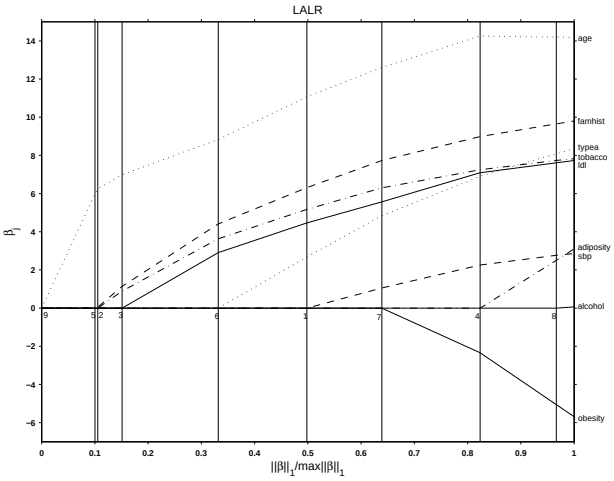


Рис. 2. Оценка коэффициентов алгоритма LALR для данных «South African Heart Disease». Вертикальные линии соответствуют шагам алгоритма. Данные стандартизованы, согласно (1).

В качестве параметров $\boldsymbol{\beta}$ возьмем, например, вектор $(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3)^\intercal = (1, -2, 6, 3)^\intercal$. В нашей модели признаки $\boldsymbol{x}_4$ и $\boldsymbol{x}_5$ являются шумовыми. Результатом работы алгоритма является последовательность весов признаков, выбираемых на каждом шаге. В данном случае алгоритм сделает шесть шагов. В таблице 1 представлены результаты работы алгоритма. Первый столбец — номера признаков, первая строка — номер шага, а соответствующая ячейка таблицы — вес признака. Признаку с номером 0 соответствует константный признак. На рис. 1 показано сравнение оценок коэффициетов, полученных с помощью LALR и Forward Stagewise. По полученным результатам можно сделать вывод, что последовательность выбираемых признаков и их весов согласуется с исходной моделью.

Данные «SAHD». Проанализирована работа алгоритма на реальных данных «South African Heart Disease», см. [2]. Данные были впервые рассмотрены в [14]. Данные SAHD представляют собой сведения о физическом состоянии 462-х пациентов мужского пола белой расы возраста от 15 до 64 лет. Описание данных состоит из 9 признаков: $\boldsymbol{x}_1$ — sbp (sistolic blood pressure), $\boldsymbol{x}_2$ — tobacco, $\boldsymbol{x}_3$ — ldl (low-density lipoprotein), $\boldsymbol{x}_4$ — adiposity, $\boldsymbol{x}_5$ — famhist (family history), $\boldsymbol{x}_6$ — typea, $\boldsymbol{x}_7$ — obesity, $\boldsymbol{x}_8$ — alcohol, $\boldsymbol{x}_9$ — age; а также вектора меток класса chd: наличие «1», или отсутствие «0» инфаркта миокарда (MI) за время обследования. На рис. 2 представлены результаты работы алгоритма.

Выводы

В данной работе предложен и исследован новый алгоритм LALR, решающий задачу отбора признаков в модели логистической регрессии, представляющий собой линеаризованный аналог алгоритма LARS. Проведена серия численных экспериментов на модельных и реальных данных «SAHD», результаты которых позволяют говорить о справедливости использования предложенного алгоритма.

Литература

[1] *Draper N., Smith H.* APpied Regression Analysis. New York: Wiley, 1966. — 407 p.

[2] *Hastie T., Tibshirani R., Friedman J.* The Elements of Statistical Learning. — New York: Springer, 2001.

[3] *Hastie T., Tibshirani R., Taylor J., Walther G.* Forward Stagewise Regression and the Monotone Lasso // Electronic Journal of Statistics, 2006. — Vol. 1.

[4] *Hocking R. R.* The Analysis and Selection of Variables in Linear Regression // Biometrics, 1976. — Vol. 32, № 1. — Pp. 1–49.

[5] *Hoerl A. E., Kennard R. W.* Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems // Technometrics, 1970. — Vol. 12, № 1. — Pp. 55–67.

[6] *Ильин В. А.* О работах А. Н. Тихонова по методам решения некорректно поставленных задач // УМН, 1967. — Т. 22, № 2. — С. 168–175.

[7] *Tibshirani R.* Regression shrinkage and selection via the lasso. // Journal of the Royal Statistical Society, 1996. — Vol. 58, № 1. — Pp. 267–288.

[8] *Efron B., Hastie T., Johnstone I., Tibshirani R.* Least angle regression. // Annals of Statistics, 2004. — Vol. 32, № 2. — Pp. 407–499.

[9] *Lawson L., Hanson R.* Solving Least Squares Problems. — Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1974.

[10] *Madigan D., Ridgeway G.* Discussion of least angle regression. // Annals of Statistics, 2004. — Vol. 32, № 2. — Pp. 465–469.

[11] *Rubin D. B.* Iteratively reweighted least squares. // Encyclopedia of statistical sciences, 1983. — Vol. 32. — Pp. 272–275.

[12] *Сухарев А. Г., Тимохов А. В.* Курс методов оптимизации. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2005.

[13] *Измаилов А. Ф.* Численные методы оптимизации. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2005.

[14] *Rousseauw J., du Plessis J., Ferreira J.* Coronary Risk Factor Screening in Three Rural Communities. // South African Medical Journal, 1983. — Vol. 64. — Pp. 430–436.

О плавно меняющихся алгоритмах классификации*

Филипенков Н. В.
n.filipenkov@mail.ru
Москва, МЦНМО

В работе рассматривается постановка задачи классификации, где предполагается, что прецеденты линейно упорядочены по времени (например, задача классификации заемщиков, последовательно обращающихся в банк за кредитом). При этом делается предположение о том, что закономерности в данных плавно меняются с течением времени. В работе предлагается подход, который при распознавании позволяет учитывать плавное изменение закономерностей в данных с течением времени. Идея подхода, предлагаемого в работе, состоит в разбиении исходной выборки на сегменты, соответствующие различным временным периодам. На каждом из сегментов строится отдельный алгоритм. При этом необходимо, чтобы алгоритмы, построенные на различных частях выборки, были близки в смысле некоторой меры сходства. Мера сходства алгоритмов зависит как от набора используемых признаков, так и от близости параметров найденных алгоритмов.

Введение

Решается задача классификации, в которой прецеденты поступают в выборку в различные моменты времени. Одним из примеров такой задачи классификации является задача кредитного скоринга.

Кредитный скоринг — это задача прогнозирования дефолта (невыплаты кредита) на основе данных анкеты заемщика, которую клиент заполняет при обращении за кредитом. Задача кредитного скоринга представляет собой задачу классификации, где признаками являются характеристики клиента (возраст, образование, семейное положение, собственность,...). В самом простом случае задача содержит два класса: «хорошие» — клиенты, исправно погашающие кредит, и «плохие» — клиенты, нарушившие график погашения платежей.

Классический подход к задаче скоринга предполагает построение моделей на выборке, в которой прецеденты не упорядочены во времени. Может выбираться «более старая» или «более новая» выборка для построения модели (как правило, логистической регрессии или дерева решений), но внутри выборки не учитывается порядок прецедентов.

Вместе с тем природа задачи предполагает наличие порядка поступления анкет-заявлений от потенциальных заемщиков, который определяется временем. Разные по времени сегменты выборки могут различаться вследствие изменения различных факторов: макроэкономической ситуации в стране, кредитной политики банка, менталитета заемщиков и т. п. Как правило, указанные факторы меняются во времени «достаточно плавно», что приводит к «плавному» изменению зависимостей в выборке.

Таким образом, для данной задачи классификации существует порядок на прецедентах, который может быть учтен для повышения качества классификации.

Подход к задаче классификации с учетом естественного порядка на прецедентах прорабатывался в рамках теории последовательного обучения (incremental learning) [1, 2]. Одним из основных свойств методов, предлагаемых в рамках данной теории, является то, что при поступлении новых прецедентов модель должна «дообучаться» и минимально использовать предшествующую выборку. Такое условие позволяет сделать обучение более вычислительно эффективным. Но при этом плавное изменение закономерностей в данных может не отражаться в построенных моделях.

В данной работе формализуется понятие плавного изменения зависимостей в выборке. Плавное изменение определяется на основе меры сходства моделей, которая зависит как от набора признаков, так и от значений параметров модели. Например, если в качестве алгоритма используется линейная регрессия, то мера сходства моделей, построенных на разных сегментах, зависит от состава признаков и от коэффициентов регрессии. Данная формализация позволяет применять подход к поиску плавно меняющихся закономерностей, аналогичный предложенному в работе [3].

Ниже приводится одна из возможных формализаций задачи поиска плавно меняющихся алгоритмов и подхода к ее решению.

Выборка и функционал ошибок

Обозначим $S = \{s_1, \ldots, s_T\}$ — выборка прецедентов $s_1, \ldots, s_T$. Пусть прецеденты в выборке расположены в соответствии с линейным порядком — временем. *Сегментом* S^τ выборки S с *началом* b^τ и *концом* e^τ назовем следующую последовательность прецедентов: $s_{b^\tau}, s_{b^\tau+1}, \ldots, s_{e^\tau}$. *Длиной* l^τ сегмента S^τ назовем количество прецедентов в сегменте: $l^\tau = e^\tau - b^\tau + 1$.

Пусть выбрана некоторая модель алгоритмов $\mathfrak{M}$. Пусть в рамках данной модели выбрано

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 09-07-00288, 10-01-09392, 10-01-90711.

некоторое непустое семейство алгоритмов $\mathfrak{M}^* \subset \mathfrak{M}$, $\mathfrak{M}^* \neq \varnothing$. Пусть определен *метод обучения* μ — отображение, которое произвольной конечной выборке S ставит в соответствие множество алгоритмов $A = \{a_1, \ldots, a_n\}$. Будем также говорить, что метод μ *строит* алгоритмы $a_1, \ldots, a_n$ по выборке S.

Предположим, что метод обучения

$$\mu(S) = \arg\min_{a \in \mathfrak{M}^*} Q(S, a),$$

где $Q(S, a)$ — это *функционал ошибок*, который произвольному алгоритму $a \in \mathfrak{M}^*$ и произвольной выборке S ставит в соответствие некоторое действительное число, характеризующее частоту ошибок алгоритма a на выборке S. Если известен функционал ошибок, то для произвольного сегмента S^τ определено множество A^τ алгоритмов $a_1^\tau, \ldots, a_n^\tau$, построенных методом μ на сегменте S^τ.

Последовательности сегментов и алгоритмов

Последовательностью сегментов $\mathfrak{S}$ выборки S назовем упорядоченное множество сегментов $\{S^1, \ldots, S^\tau, \ldots, S^\theta\}$, удовлетворяющее следующим условиям:

$$\begin{aligned} &b^1 = 1,\ e^\theta = T, \\ &b^\tau < b^{\tau+1},\ e^\tau < e^{\tau+1},\ \tau = 1, \ldots, (\theta - 1), \\ &\forall t \in \{1, \ldots, T\}\ \exists \tau \in \{1, \ldots, \theta\} \colon s_t \in S^\tau, \end{aligned} \qquad (1)$$

где b^τ и e^τ — соответственно начало и конец сегмента S^τ. Число θ называется *длиной последовательности сегментов* $\mathfrak{S}$. Последовательность сегментов $\mathfrak{S}$ называется *разбиением* выборки, если $b^{i+1} = e^i + 1$ при $i \in \{1, \ldots, \theta - 1\}$.

Несмотря на то, что в работе введено определение разбиения, все описанные ниже построения справедливы для произвольных последовательностей сегментов (в том числе таких, в которых один прецедент может принадлежать нескольким сегментам).

Пусть заданы некоторая последовательность сегментов $\mathfrak{S}$ выборки S и непустое семейство алгоритмов $\mathfrak{M}^*$. Пусть также определен функционал ошибок $Q(S^\tau, a)$. Тогда на каждом сегменте S^τ может быть построено множество алгоритмов A^τ. *Множеством* $\mathfrak{A}$ *плавно меняющихся алгоритмов*, порожденным последовательностью сегментов $\mathfrak{S}$ будем называть декартово произведение множеств алгоритмов, построенных на каждом из отрезков:

$$\mathfrak{A} = A^1 \times \ldots \times A^\theta.$$

Плавно меняющимся алгоритмом $\mathfrak{a} \in \mathfrak{A}$ назовем последовательность алгоритмов $a^1, \ldots, a^\theta$, где $a^\tau \in A^\tau$, $\tau = 1, \ldots, \theta$. При этом алгоритмы $a^1, \ldots, a^\theta$ называются *стадиями эволюции* $\mathfrak{a}$. Будем говорить, что плавно меняющийся алгоритм $\mathfrak{a}$ построен на последовательности сегментов $\mathfrak{S}$.

Пусть плавно меняющийся алгоритм $\mathfrak{a} = \{a^1, \ldots, a^\theta\}$ построен на последовательности сегментов $\mathfrak{S} = \{S^1, \ldots, S^\theta\}$. Тогда определен *вектор ошибок* $\mathfrak{Q}(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{a}$ на соответствующих сегментах из $\mathfrak{S}$:

$$\mathfrak{Q}(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) = \{Q(S^1, a^1), \ldots, Q(S^\theta, a^\theta)\} \in \mathbb{R}^\theta.$$

Пусть на семействе алгоритмов $\mathfrak{M}^*$ введено *расстояние между алгоритмами* $\rho : \mathfrak{M} \times \mathfrak{M} \to \mathbb{R}$, удовлетворяющее следующим аксиомам:

$$\begin{gathered} \rho(a^1, a^2) \geqslant 0,\ \ \forall a^1, a^2 \in \mathfrak{M}^*, \\ \rho(a, a) = 0,\ \ \forall A \in \mathfrak{M}^*, \\ \rho(a^1, a^2) = \rho(a^2, a^1),\ \ \forall a^1, a^2 \in \mathfrak{M}^*. \end{gathered}$$

Тогда для любого непустого ($\theta > 0$) плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{a} = \{a^1, \ldots, a^\theta\}$ можно определить его *длину* $L(\mathfrak{a})$:

$$L(\mathfrak{a}) = \sum_{\tau=1}^{\theta-1} \rho(a^\tau, a^{\tau+1}).$$

Для плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{a} = \{a\}$, состоящего из единственного алгоритма a будем по определению полагать $L(\mathfrak{a}) = 0$.

Функционал штрафа

Пусть задана выборка S, последовательность сегментов $\mathfrak{S} = \{S^1, \ldots, S^\theta\}$ выборки S и непустое семейство алгоритмов $\mathfrak{M}^*$. Тогда последовательность $\mathfrak{S}$ порождает множество плавно меняющихся алгоритмов $\mathfrak{A}$.

Пусть для произвольного плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{a} \in \mathfrak{A}$ определен вектор ошибок $\mathfrak{Q}(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{a}$ на соответствующих сегментах из $\mathfrak{S}$ и его длина $L(\mathfrak{a})$. Тогда возможно определить *функционал штрафа* $F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{a}$ последовательности сегментов $\mathfrak{S}$:

$$\begin{aligned} F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) &= f(\mathfrak{Q}(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}), L(\mathfrak{a})) = \\ &= f(Q^1, \ldots, Q^\tau, \ldots, Q^\theta, L) \to \min_{\mathfrak{S}, \mathfrak{a}}. \end{aligned}$$

Здесь функция f определяет отображение из $\mathbb{R}^{\theta+1}$ в $\mathbb{R}$, θ — это количество стадий эволюции плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{A}$, $Q^\tau = Q(S^\tau, a^\tau)$ при $\tau = 1, \ldots, \theta$. При этом функция f обладает следующими свойствами:

$$\begin{gathered} \frac{\partial f}{\partial Q^\tau} > 0,\ \forall Q^\tau \in \mathbb{R}, \forall \tau = 1, \ldots, \theta, \\ \frac{\partial f}{\partial L} > 0,\ \forall L \in \mathbb{R}. \end{gathered}$$

Таким образом, задача поиска оптимального плавно меняющегося алгоритма сводится к поиску последовательности отрезков $\mathfrak{S}$, минимизирующей функционал штрафа $F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$. Эта оптимизация выражается в минимизации функционалов ошибок $\mathfrak{Q}(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ стадий эволюции a^τ, $\tau = 1, \ldots, \theta$ алгоритма $\mathfrak{a}$ и минимизации различия соседних стадий эволюции — длины плавно меняющегося алгоритма $L(\mathfrak{a})$.

Пусть последовательность сегментов $\mathfrak{S} = \{S^1, \ldots, S^\theta\}$ порождает множество плавно меняющихся алгоритмов $\mathfrak{A} = \{A^1, \ldots, A^\theta\}$. Одной из возможных форм функционала штрафа $F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{a}$, построенного на последовательности сегментов $\mathfrak{S}$, является следующий функционал:

$$F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) = F_\lambda(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) = \lambda|\mathfrak{Q}(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})| + (1-\lambda)L(\mathfrak{a}) \to \min_{\mathfrak{S}, \mathfrak{a}},$$

где $|\mathfrak{Q}(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})| = \sum\limits_{\tau=1}^{\theta} \frac{l^\tau}{T} Q(S^\tau, a^\tau)$, $Q(S^\tau, a^\tau)$ — функционал ошибок алгоритма a^τ на сегменте S^τ при $\tau = 1, \ldots, \theta$. Параметр λ называется *коэффициентом адаптации* функционала штрафа $F_\lambda(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$. Коэффициент адаптации λ определяет приоритетность минимизации функционалов ошибок и длины плавно меняющегося алгоритма.

Рассмотрим два случая. Пусть $\lambda = 0$. Тогда функционал штрафа $F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ принимает следующий вид:

$$F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) = F_0(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) = L(\mathfrak{a}) \to \min_{\mathfrak{S}, \mathfrak{a}}.$$

В этом случае минимизируется только длина плавно меняющегося алгоритма $\mathfrak{a}$. Таким образом, оптимальным алгоритмом будет плавно меняющийся алгоритм, у которого $L(\mathfrak{a}) = 0$. Таким алгоритмом по определению длины L является, например, $\mathfrak{a} = \{a\}$, где алгоритм a порождается всей выборкой S: $\mathfrak{S} = \{S\}$.

Пусть $\lambda = 1$. Тогда функционал штрафа $F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ принимает следующий вид:

$$F(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) = F_1(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) = \sum_{\tau=1}^{\theta} \frac{l^\tau}{T} Q(S^\tau, a^\tau) \to \min_{\mathfrak{S}, \mathfrak{a}}.$$

Здесь минимизируется только средневзвешенный функционал ошибок $Q(S^\tau, a^\tau)$, $\tau = 1, \ldots, \theta$.

Теорема 1. *Пусть S — выборка прецедентов. Семейство алгоритмов $\mathfrak{M}^*$ и функционал ошибок $Q(S^\tau, a)$ устроены таким образом, что*

$$l^1 \min_a Q(S^1, a) + l^2 \min_a Q(S^2, a) \leqslant l^3 \min_a Q(S^3, a),$$

где S^1, S^2, S^3 — произвольные сегменты выборки S, удовлетворяющие условиям $S^3 = S^1 \cup S^2$ и $S^1 \cap S^2 = \varnothing$; l^1, l^2, l^3 — соответственно длины отрезков S^1, S^2, S^3. Пусть последовательность $\mathfrak{S}_0$ состоит из сегментов длины 1: $S_0^1, \ldots, S_0^T$, $S_0^1 = \{s_1\}, \ldots, S_0^T = \{s_T\}$.

Тогда $\min\limits_a F_1(\mathfrak{S}_0, \mathfrak{a}) \leqslant \min\limits_a F_1(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ для любых последовательностей сегментов $\mathfrak{S}$.

Настоящая теорема показывает, что при определенных условиях использование функционала штрафа $F_\lambda(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$ с параметром $\lambda = 1$ приводит к тому, что оптимальной оказывается последовательность сегментов, в которой каждый сегмент состоит из минимального количества прецедентов, что приводит к переобучению. Условия на функционал ошибок в утверждении $Q(S^\tau, a)$ являются вполне естественными, если под функционалом понимать, например, долю ошибок на обучающей выборке, которая на малой выборке при достаточно богатом семействе используемых алгоритмов может равняться нулю.

Граф алгоритмов

Пусть S — выборка прецедентов. Тогда задача поиска оптимального плавно меняющегося алгоритма может быть представлена как поиск кратчайшего пути на графе.

Граф алгоритмов — это ориентированный граф со взвешенными вершинами и ребрами. Множество вершин графа — это пары сегмент-алгоритм (S^τ, a). Множество дуг задается как множество всех пар соседних сегментов выборки S, удовлетворяющих условиям (1). При этом дуга ориентирована от более раннего по времени сегмента к более позднему. Весом вершины (S^τ, a) является значение $Q(S^\tau, a)$. Весом дуги, соединяющей вершины (S^1, a^1) и (S^2, a^2) является расстояние $\rho(a^1, a^2)$ между алгоритмами a^1 и a^2.

Поиск кратчайшего пути на ориентированном графе со взвешенными вершинами и ребрами сводится к стандартной задаче поиска кратчайшего пути на ориентированном графе со взвешенными ребрами. Для этого достаточно вес вершины аддитивно включить в вес всех дуг, исходящих из нее. Оптимизация реализуется, например, алгоритмом Дейкстры.

В случае, если в качестве функционала штрафа, используется функционал $F_\lambda(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})$, то веса на графе алгоритмов определяются следующим образом.

$$\begin{aligned} F_\lambda(\mathfrak{S}, \mathfrak{a}) &= \lambda|\mathfrak{Q}(\mathfrak{S}, \mathfrak{a})| + (1-\lambda)L(\mathfrak{a}) = \\ &= \lambda \sum_{\tau=1}^{\theta} \frac{l^\tau}{T} Q(S^\tau, a^\tau) + (1-\lambda) \sum_{\tau=1}^{\theta-1} \rho(a^\tau, a^{\tau+1}) = \\ &= \lambda \frac{l^1}{T} Q(S^1, a^1) + \lambda \sum_{\tau=2}^{\theta} \frac{l^\tau}{T} Q(S^\tau, a^\tau) + \end{aligned}$$

$$+ (1-\lambda)\sum_{\tau=1}^{\theta-1}\rho(a^\tau, a^{\tau+1}) = \lambda\frac{l^1}{T}Q(S^1,a^1) +$$

$$+\sum_{\tau=2}^{\theta}\left(\lambda\frac{l^\tau}{T}Q(S^\tau,a^\tau)+(1-\lambda)\rho(a^{\tau-1},a^\tau)\right) =$$

$$= \lambda\frac{l^1}{T}Q(S^1,a^1) +$$

$$+\sum_{\tau=2}^{\theta}\left(\lambda\frac{l^\tau}{T}Q(S^\tau,a^\tau)+(1-\lambda)\rho(a^{\tau-1},a^\tau)\right) =$$

$$= \lambda\frac{l^1}{T}Q(S^1,a^1) + \sum_{\tau=2}^{\theta} w_{\tau-1,\tau}.$$

Таким образом, если используется функционал штрафа $F_\lambda(\mathfrak{S},\mathfrak{a})$, то вес дуги на графе, соединяющей вершины (S^i,a^i) и (S^j,a^j), записывается следующим образом:

$$w_{i,j} = \lambda\frac{l^j}{T}Q(S^j,a^j) + (1-\lambda)\rho(a^i,a^j).$$

Пример 1. Рассмотрим структуру графа алгоритмов для выборки S, состоящей из трех прецедентов s_1, s_2 и s_3. Обозначим все возможные отрезки следующим образом: $S^1=\{s_1\}$, $S^2=\{s_2\}$, $S^3=\{s_3\}$, $S^4=\{s_1,s_2\}$, $S^5=\{s_2,s_3\}$. Предположим, что семейство алгоритмов $\mathfrak{M}^*$ и функционал ошибок $Q(S^i,a)$ позволяют построить единственный алгоритм a^0 на всей выборке S и a^i на каждом из сегментов S^i, $i=1,\ldots,4$. При этом построены два алгоритма a^5 и a^6 на сегменте S^5 ($S^6\equiv S^5$). Тогда граф алгоритмов выглядит так, как это показано на Рис. 1.

Теорема 2. *Пусть задана некоторая выборка S; семейство алгоритмов $\mathfrak{M}^*$ и функционал ошибок $Q(S^i,a)$ позволяют построить k алгоритмов на каждом из отрезков выборки S. Тогда число вершин графа алгоритмов равно $\frac{1}{2}T(T+1)k$.*

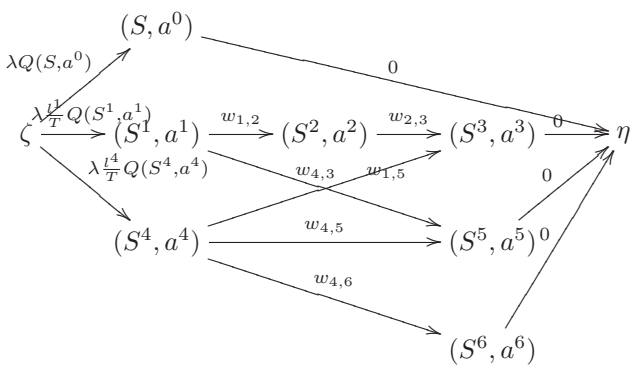


Рис. 1. Граф алгоритмов.

Выводы

В настоящей работе предложен подход к поиску плавно меняющихся алгоритмов. Приведенное формализованное описание подхода может быть применено для различных семейств алгоритмов.

Таким образом, если в задаче классификации существует линейный порядок на прецедентах, предложенный подход может быть полезен для повышения эффективности выявления скрытых закономерностей в данных.

Литература

[1] *Giraud-Carrier C.* A Note on the Utility of Incremental Learning // AI Communications. — 2000. — Vol. 13. — Pp. 215–223.

[2] *Lange S., Grieser G.* On the Strength of Incremental Learning // Proc. of the 10th Int. Conf. on Algorithmic Learning Theory 1999 — Pp. 118–131.

[3] *Филипенков Н. В.* Об одном методе поиска плавно меняющихся закономерностей в пучках временных рядов // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2009. — Т. 49, № 11. — С. 2020–2040.

Экспертно-структурные методы построения хорошо интерпретируемых классификаций*

Чернявский А. Л., Дорофеюк А. А., Дорофеюк Ю. А.
achern@ipu.ru
Москва, Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН

Разработаны методы классификации, которые достаточно хорошо поддаются содержательному описанию и интерпретации. Описаны три алгоритма построения содержательно хорошо интерпретируемых классификаций — покоординатная, спрямляющая и содержательно-экспертная.

Expert-structural methods of well interpretable classifications generation*

Chernyavkiy A. L., Dorofeyuk A. A., Dorofeyuk J. A.
Institute of Control Sciences named by V. A. Trapeznikov RAS, Moscow, Russia

The classification methods, which can properly be contensively described and interpreted, are developed. Three algorithms for well interpretable classifications generation — coordinate-wise, rectifying and expert-contensive are described.

Структурно-классификационный анализ данных [1] достаточно часто используется для получения так называемого «сжатого» описания исходной информации. В последующем такое описание широко используется в различных прикладных системах поддержки принятия управленческих решений [2].

При этом такое «сжатие» информации достигается за счёт структуризации исходной информации — совокупности значений исходных параметров, характеризующих множество анализируемых объектов. Такая структуризация осуществляется за счёт экстремальной группировки исходных параметров, а также автоматической классификации (кластеризации) объектов, где каждый класс представляется только одним объектом-эталоном m_j (обычно это центр класса) и стандартными отклонениями σ_j, характеризующими разброс объектов этого класса относительно эталона. При небольшом числе классов такое описание оказывается достаточно экономным.

Однако для того чтобы результаты классификации можно было использовать в прикладных задачах, существенна не только «экономность» такого представления исходной информации, но и удобство для специалиста-предметника интерпретировать полученную структуризацию в содержательных терминах. Представление в виде набора эталонов классов и стандартных отклонений удобно для компьютера, но мало что говорит самому специалисту-предметнику. До сих пор проблеме интерпретируемости классификаций уделялось недостаточное внимание. Отчасти это связано с тем, что в практических задачах классификация часто использовалась как вспомогательное средство для построения регрессионной зависимости (кусочная аппроксимация) [1, 3], когда интерпретируемость классификации не так существенна. В работе описаны три алгоритма построения содержательно хорошо интерпретируемых классификаций — покоординатная, спрямляющая, а также содержательно— экспертная.

Для алгоритмов покоординатной и спрямляющей классификации множество значений каждого показателя разбивается на небольшое число диапазонов. При этом классификация фактически задаётся набором границ этих диапазонов. Как только границы диапазонов определены, каждый объект получает описание в виде позиционного кода, где число позиций равно числу показателей. Классом в такой классификации является совокупность объектов с идентичными кодами.

Покоординатная классификация осуществляет для каждого показателя независимое от других разбиение на заданное число диапазонов, то есть искомая классификация задается сочетанием одномерных классификаций по каждому из исходных показателей. Основное преимущество такой классификации — возможность использования алгоритмов глобально-оптимальной одномерной классификации [2, 4].

Спрямляющая классификация строится как своего рода аппроксимация многомерной классификации, например, осуществляется поиск границ диапазонов, для которых будет минимальным число объектов, оказавшихся по другую сторону границы от большинства объектов того же класса.

В некоторых прикладных задачах возникает ситуация, когда каждый из имеющегося множества объектов, подлежащих классификации, задан своим названием и содержательным описанием. Кроме того, экспертным путём задана, так называемая «содержательная» классификация, которая определяется названиями и содержательным описанием

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты №№ 08-07-00349, 08-07-00427, 10-07-00210.

классов. Требуется по этой информации о заданном множестве объектов провести их классификацию. В работе предложен алгоритм содержательно-экспертной классификации для решения подобных задач.

Алгоритмы построения покоординатной и спрямляющей классификаций

Для построения хорошо интерпретируемой классификации множества значений каждого исследуемого показателя разбивается на небольшое число диапазонов. Так, например, при разбиении на 3 диапазона они интерпретируются как диапазоны «высоких», «средних» и «низких» значений соответствующего показателя. Таким образом, хорошо интерпретируемая классификация задаётся набором границ диапазонов значений каждого показателя, участвующего в классификации. Тогда задача сводится к нахождению таких границ диапазонов параметров, которые отражают реальную структуру взаиморасположения объектов в многомерном пространстве признаков.

Как только границы диапазонов найдены, каждый объект получает описание в виде позиционного вектора кодов, имеющего вид $(P_1, \ldots, P_k)$, где число позиций k равно числу участвующих в классификации показателей. Такой код означает, что этот объект принадлежит классу с номером P_1 для первого показателя, P_2 — второго, и т.д. Классом хорошо интерпретируемой классификации является совокупность объектов с идентичными описаниями. Разработано два типа алгоритмов построения хорошо интерпретируемых классификаций.

Покоординатная классификация. Очевидно, самый простой способ построения хорошо интерпретируемой классификации — независимое (от других показателей) разбиение множества значений каждого показателя на заданное число диапазонов. В этом случае хорошо интерпретируемая классификация задаётся как сочетание (произведение в теоретико-множественном смысле) одномерных классификаций по каждому показателю. Такую классификацию будем называть *покоординатной классификацией*. Другими словами, покоординатная классификация H записывается через одномерные классификации $H^{(i)}$ следующим образом $H = (H^{(1)} \otimes \cdots \otimes H^{(k)})$, где $i = 1, \ldots, k$ — номер классифицируемых показателей. Основное преимущество такой классификации — возможность использования алгоритмов оптимальной одномерной классификации [2, 4], позволяющих получать глобальный оптимум соответствующего критерия качества классификации. Другим важным преимуществом покоординатной классификации является её простота и наглядность. Отметим также, что если количество диапазонов по каждому показателю задано, то довольно сложная для многомерной классификации проблема выбора числа классов отпадает. Пусть, например, построена трехмерная покоординатная классификация с тремя диапазонами по каждому показателю. Это означает, что пространство объектов оказывается разбитым на $3^3 = 27$ областей, а число классов r будет таким, каким оно фактически «получится», то есть $r = 27 - r_0$, где r_0 — число областей, в которых не оказалось ни одного объекта.

Спрямляющая классификация. Недостатком покоординатной классификации является то, что она строится по одномерной проекции многомерного распределения объектов в пространстве показателей, то есть не учитывает большую часть информации о структуре множества объектов. Второй способ построения хорошо интерпретируемой классификации позволяет устранить этот недостаток.

При этом способе основой для хорошо интерпретируемой классификации является многомерная классификация. В работе для этой цели используется комплексный алгоритм многомерной автоматической классификации [4]. Хорошо интерпретируемая классификация строится как своего рода аппроксимация этой многомерной классификации.

Поскольку задача состоит в том, чтобы хорошо интерпретируемая классификация наилучшим образом аппроксимировала многомерную классификацию, будем искать такие границы диапазонов, при которых количество «отсеченных» объектов, то есть объектов, оказавшихся по другую сторону границы от большинства объектов своего класса, будет минимальным.

Очевидно, что такие границы легко находятся простым перебором. Описания «отсеченных» объектов, оказавшихся по другую сторону границы диапазона, изменяются. Новое описание может совпасть с описанием одного из имеющихся классов (в этом случае будем говорить, что объект «переходит» в другой класс). В противном случае «отсеченный» объект образует новый класс. Построенную таким образом классификацию будем называть *спрямляющей классификацией*. Количество возникших при построении спрямляющей классификации новых классов и количество точек в них могут служить характеристикой качества аппроксимации исходной многомерной классификации спрямляющей классификацией.

Заметим, что число классов в спрямляющей классификации, как и в случае покоординатной классификации, в основном определяется фактической структурой точек в многомерном пространстве.

В общем случае покоординатная и спрямляющая классификации даже при одинаковом числе

диапазонов разбиения показателей могут давать разные результаты. В прикладных работах из этих двух типов алгоритмов в основном используется спрямляющая классификация.

Алгоритм построения содержательно-экспертной классификации

Как уже говорилось выше, в некоторых прикладных задачах подлежащие классификации объекты задаются только своим названием и/или содержательным описанием. Не задано ни пространство признаков X, ни матрица расстояний (близости) между объектами. Ясно, что в этой ситуации невозможно использовать формальные алгоритмы автоматической классификации. Однако кроме этого задана (экспертным путём) так называемая «содержательная» классификация, которая определяется названиями и содержательным описанием классов. Специально для подобных случаев разработан *алгоритм содержательно-экспертной классификации объектов*. Этот алгоритм включает три этапа.

Первый этап. На первом этапе с помощью специальной экспертной процедуры производится формирование пространства признаков, в котором далее будет строиться классификация n объектов, заданных с помощью описания в содержательных терминах. Этот этап выполняется с помощью m экспертов — специалистов в соответствующей предметной области. Однако от экспертов, в отличие от обычных экспертных процедур в области шкалирования, уже не требуется определять меру близости между каждой парой объектов (например, указанием конкретного числа, оценивающего эту близость). Перед ними ставится более простая задача — пользуясь уже имеющейся «содержательной» классификацией на k классов, необходимо для каждого объекта указать, к какому из этих k классов эксперт его относит.

Если эксперт затрудняется выбрать какой-то один класс (а это — типичная ситуация), он может отнести этот объект одновременно к двум и более классам. В результате каждый эксперт для каждого объекта формирует m-позиционный код из единиц и нулей. В l-ой позиции этого кода стоит 1 в том случае, если эксперт отнёс объект к l-ому классу, в противном случае там будет стоять 0. Если же, по мнению эксперта по имеющейся информации объект нельзя отнести ни к одному из классов, ему присваивается код из одних нулей (то есть эксперт фактически отказывается от классификации этого объекта). Для таких объектов создаётся так называемый «фоновый» класс [4, 5].

Поскольку разные эксперты могут вкладывать в одни и те же понятия разное содержание, они могут присвоить одним и тем же объектам разные коды. В детерминированной постановке значение каждой позиции итогового кода объекта определяется простым большинством голосов — на этой позиции стоит 1, если более половины экспертов поставили там 1, в противном случае там будет стоять 0.

В размытой постановке в l-ой позиции итогового кода объекта стоит среднее арифметическое значений чисел, стоящих в l-ой позиции кодов объекта для всех экспертов. Более того, в размытой постановке экспертам разрешается (или от них требуется) ставить не 1 или 0, а некоторое число $y_i^j(s)$; $i = 1, \ldots, n$; $j = 1, \ldots, k$; $s = 1, \ldots, m$, которое интерпретируется как оценка s-м экспертом «степени принадлежности» (достоверности отнесения) i-го объекта к j-му классу. В этом случае на j-ой позиции итогового кода i-го объекта будет стоять число $x_i^j = \frac{1}{m}\sum_{s=1}^{m} y_i^j(s)$. Если на всех позициях итогового кода некоторых объектов стоит 0, то эти объекты относятся к фоновому классу (отказ от классификации). Следует отметить, что таких случаев при решении прикладных задач нам не встречалось, это говорит о достаточно высоком качестве исходной информации и высокой квалификации экспертов.

Таким образом, построено m-мерное пространство признаков X, в котором i-ому объекту соответствует точка $x_i = (x_i^{(1)}, \ldots, x_i^{(k)})$. Множество n точек $\{x_1, \ldots, x_n\}$ определённых в пространстве X, по построению соответствует множеству n исходных объектов, то есть классификация объектов эквивалентна классификации этих точек.

Второй этап — автоматическая классификация n точек в пространстве признаков X, построенном на первом этапе. Для этой цели используются обычные алгоритмы автоматической классификации (кластер-анализа). В работе для этой цели использовался комплексный алгоритм многомерной автоматической классификации [4].

В качестве расстояния $R(x_i, x_j)$ в выражении $K(x_i, x_j) = 1/\{1 + \alpha R^p(x_i, x_j)\}$ для меры близости (потенциальной функции) между точками x_i и x_j принимается либо расстояние по Хеммингу (число несовпадающих разрядов в их кодах) — в детерминированной постановке, либо расстояние по Евклиду — в размытой постановке.

Поскольку некоторые объекты могут действительно (а не только по мнению экспертов) относиться к нескольким подклассам одновременно, в работе используется размытый вариант комплексного алгоритма автоматической классификации [4, 5].

Напомним размытую постановку задачи автоматической классификации с фоновым классом [5]. Во многих задачах классификационного анализа приходится классифицировать объекты одинаково далёкие от всех классов, на-

пример, при грубых ошибках наблюдений или при неправильно выбранном числе классов (заниженном по отношению к «истинному»). Поэтому целесообразно ввести в рассмотрение специальный класс, в пределах которого не учитывается близость объектов друг к другу. Такой класс называется фоновым. Классификация задаётся вектор-функцией $H(x) = \big(h_0(x), \ldots, h_r(x)\big)$, где $h_0(x)$ — функция принадлежности x к фоновому классу, а $h_i(x)$, $i = 1, \ldots, r$ — функция принадлежности x к i-му нефоновому классу. Функция удовлетворяет следующему условию: для любого x значение $H(x)$ принадлежит некоторому ограниченному множеству V пространства значений вектор-функции $H(x)$, то есть $H(x) \in V \subseteq \mathbb{R}^k$. Показано, что множество V определяет тип размытости рассматриваемой задачи автоматической классификации [5]. Так, например, для t-размытой классификации функции принадлежности должны удовлетворять ограничениям, которые собственно и задают границы множества V для этого случая:

$$\sum_{i=0}^{r} \big(h_i(x)\big)^t = 1, \quad x \in X,$$

где $h_i(x) \geqslant 0$, $i = 1, \ldots, r$, $t > 1$.

Следует подчеркнуть, что число классов r, на которое производится классификация точек в пространстве X, вовсе не обязательно должно совпадать с числом классов k содержательно заданной классификации (в прикладных задачах они чаще всего не совпадают). В составе комплексного алгоритма автоматической классификации [4] есть специальная экспертно-компьютерная процедура выбора в определённом смысле оптимального числа классов r_{opt}, которая и используется на втором этапе алгоритма содержательно-экспертной классификации.

Третий этап — экспертная оценка полученной на втором этапе классификации. Здесь возможны два варианта. В первом варианте эксперты оценивают полученную классификацию как удовлетворительную и достаточно хорошо содержательно интерпретируемую. На этом алгоритм завершает свою работу.

При втором варианте — эксперты оценивают полученную классификацию как неудовлетворительную. В этом случае на базе кодов и содержательного описания объектов, попавших в один и тот же класс, эксперты формируют содержательное описание каждого класса из классификации, полученной на втором этапе алгоритма, а совокупность таких описаний составляет содержательное описание классификации в целом. Это описание является исходным для второго цикла работы алгоритма содержательно-экспертной классификации. Алгоритм прекращает работу либо когда классификация, полученная на втором этапе некоторого цикла, будет признана экспертами удовлетворительной, либо когда на каком-то цикле будет получена классификация, которая уже встречалась ранее. В последнем случае считается, что для имеющегося состава экспертов предоставленной информации недостаточно для получения удовлетворительной классификации.

Выводы

Разработанные экспертно-классификационные алгоритмы использовались при решении широкого класса прикладных задач, в основном при исследовании крупномасштабных социально-экономических и организационно-административных систем, в том числе при анализе и совершенствовании систем управления региональным здравоохранением и региональными пассажирскими автоперевозками, в задаче оценки и прогнозирования социального развития регионов России, при разработке методики оценки эффективности функционирования системы управления жилищно-коммунального хозяйства крупного города, при формировании образовательных стандартов, при структурно-классификационной обработке сложных медико-биологических сигналов и др. Во всех приложениях, а также при машинном моделировании, была подтверждена высокая эффективность разработанных алгоритмов.

Литература

[1] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Классификационный анализ данных // «Избранные труды Международной конференции по проблемам управления. Том 1», Москва: СИНТЕГ, 1999.

[2] *Дорофеюк Ю. А., Дорофеюк А. А., Покровская И. В.* Методология экспертно-классификационного анализа в задаче оценки развития крупномасштабных региональных систем // Управление развитием крупномасштабных систем (MLSD'2007): Труды первой международной конференции, М.: ИПУ РАН — 2007. — С. 132–139.

[3] *Бауман Е. В., Гольдовская М. Д., Дорофеюк Ю. А.* Методы кусочно-линейной аппроксимации и их использование в задачах управления // Таврический вестник информатики и математики. — 2008. — № 1. — С. 73–79.

[4] *Дорофеюк Ю. А.* Комплексный алгоритм автоматической классификации и его использование в задачах анализа и принятия решений // Таврический вестник информатики и математики. — 2008. — № 1. — С. 171–177.

[5] *Бауман Е. В.* Методы размытой классификации (вариационный подход) // Автоматика и телемеханика. — 1988. — № 12.— С. 143–156.

Интеллектуальный анализ k-значных данных*

Янковская А. Е., Китлер С. В.
ayyankov@gmail.com, kitsv@sibmail.com
Томск, Томский государственный архитектурно-строительный университет

Данная статья посвящена описанию интеллектуального анализа данных (ИАД) в пространстве k-значных признаков. Излагается алгоритм ИАД, заключающийся в построении диагностических тестов одновременно с выявлением закономерностей. Приводится иллюстративный пример. Алгоритм реализован в виде динамически подключаемого модуля к интеллектуальному инструментальному средству ИМСЛОГ.

Intelligent analysis of k-valued data*

Yankovskaya A. Y., Kitler S. V.
Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russian Federation

Authors describe algorithm of intelligent data analysis in k-valued features space. This algorithm constructs diagnostic tests with simultaneous revealing of regularities. An illustrative example is given. Software realization of the algorithm is made in form of plug-in module for the intelligent instrumental software IMSLOG described.

Введение

Анализ данных при решении задач большой размерности является довольно сложным и трудоёмким процессом. В связи с этим весьма актуально применение технологий интеллектуального анализа данных (ИАД). К настоящему времени известно большое количество работ в области создания алгоритмов ИАД, к которым относятся и алгоритмы, представленные в публикациях [1–6]. В отличие от применяемой в публикациях [1–3] модели представления данных и знаний с одним механизмом классификации, нами используется матричная модель данных и знаний [4] в пространстве k-значных признаков с произвольным количеством механизмов классификации (классификационных признаков), на основе которой одновременно с выявлением различного рода закономерностей осуществляется построение диагностических тестов (ДТ) . Задача построения ДТ в данном исследовании, как и в публикациях [1, 7] сводится к нахождению безызбыточных [4, 5] (тупиковых [1]) столбцовых покрытий k-значных матриц. В связи с полиномиальной сложностью задачи нахождения столбцовых покрытий [7] весьма актуальна задача сокращения перебора.

Основная идея данной работы заключается в преобразовании исходного матричного описания данных и знаний к матричному описанию меньшей размерности, что приводит к сокращению перебора при выявлении различного рода закономерностей.

Основные понятия и определения. Закономерности в данных и знаниях

Воспользуемся определениями и понятиями, введёнными в [1, 4, 5, 7].

Данные и знания, используемые для выявления закономерностей, представляются в виде матричной модели, включающей целочисленную матрицу описаний ($\mathbf{Q}$), задающую описание объектов в пространстве характеристических признаков $z_1, \ldots, z_m$, и целочисленную матрицу различений ($\mathbf{R}$), задающую разбиение объектов на классы эквивалентности по каждому механизму классификации. Если значение характеристического признака несущественно для объекта, то данный факт отмечается прочерком («–») в соответствующем элементе матрицы $\mathbf{Q}$. Множество всех неповторяющихся строк матрицы $\mathbf{R}$ сопоставлено множеству выделенных образов, представленных одностолбцовой матрицей $\mathbf{R}'$, элементами которой являются номера образов [4, 5].

Приведём пример матриц $\mathbf{Q}$, $\mathbf{R}$ и $\mathbf{R}'$ (рис. 1).

$$\boldsymbol{Q}=\begin{array}{c}\begin{matrix}z_1 & z_2 & z_3 & z_4 & z_5 & z_6 & z_7 & z_8\end{matrix}\\ \left[\begin{array}{cccccccc|c} 3 & 4 & 8 & 9 & 5 & 1 & 3 & 4 & 1\\ 2 & 5 & 7 & 9 & 4 & 1 & 5 & 4 & 2\\ 3 & 5 & 7 & 8 & 3 & 0 & 8 & 4 & 3\\ 4 & 2 & 6 & 8 & 4 & 1 & 5 & 4 & 4\\ 3 & 3 & 8 & 8 & 4 & 1 & 5 & 4 & 5\\ 2 & 3 & 8 & 8 & 4 & 1 & 3 & 4 & 6\\ 1 & 2 & 8 & 8 & 3 & - & 3 & 4 & 7\\ 1 & - & 7 & 8 & 4 & 0 & 6 & 4 & 8\\ 2 & 6 & 7 & 9 & 5 & 1 & 3 & 4 & 9\\ 1 & 4 & 8 & 8 & 3 & 0 & 4 & 4 & 10 \end{array}\right]\end{array} \boldsymbol{R}=\begin{array}{c}\begin{matrix}k_1 & k_2\end{matrix}\\ \left[\begin{array}{cc} 1 & 1\\ 1 & 1\\ 1 & 2\\ 1 & 2\\ 1 & 1\\ 2 & 1\\ 1 & 2\\ 2 & 2\\ 2 & 1\\ 2 & 2 \end{array}\right]\end{array} \boldsymbol{R'}=\left[\begin{array}{c} 1\\ 1\\ 2\\ 2\\ 1\\ 3\\ 2\\ 4\\ 3\\ 4 \end{array}\right]$$

Рис. 1. Матричное представление данных и знаний.

Данная модель позволяет представлять не только данные, но и знания экспертов, поскольку одной строкой матрицы $\mathbf{Q}$ можно задавать в интервальной форме подмножество объектов, для которых характерны одни и те же итоговые решения, задаваемые соответствующими строками матрицы $\mathbf{R}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-01-00462-а и проект № 09-01-99014-р_офи.

Отметим, что в рассматриваемой модели недопустимо пересечение описаний объектов из разных образов.

Тестом [1] называется совокупность признаков, различающих любые пары объектов, принадлежащих разным образам (классам по каждому из механизмов классификации [5]). Тест называется минимальным, если содержит минимальное количество признаков. Тест называется безызбыточным, если содержит безызбыточное количество признаков.

Под закономерностями в знаниях будем понимать подмножества признаков с определенными легко интерпретируемыми свойствами, влияющими на различимость объектов из разных образов, устойчиво наблюдаемыми для объектов из обучающей выборки и проявляющимися на других объектах той же природы, а также весовые коэффициенты признаков, задающие различимость объектов из разных образов.

К упомянутым подмножествам будем относить константные (принимающие одно и тоже значение для всех образов), устойчивые (константные внутри образа, но не являющиеся константными), неинформативные (не различающие ни одной пары объектов), альтернативные (в смысле включения в ДТ), зависимые (в смысле включения подмножеств различимых пар объектов), несущественные (не входящие ни в один безызбыточный ДТ), обязательные (входящие во все безызбыточные ДТ) признаки, а также все минимальные и все (либо часть — при большом признаковом пространстве) безызбыточные различающие подмножества признаков, являющиеся, по сути, соответственно минимальными и безызбыточными ДТ [5].

Далее устойчивые признаки будем обозначать через r_i^j, где i — номер признака, j — номер образа.

Также к закономерностям относятся весовые коэффициенты признаков, формула для вычисления которых приведена в [5].

Безызбыточный безусловный диагностический тест (ББДТ) [1] характеризуется одновременным предъявлением всех входящих в него признаков исследуемого объекта при принятии решений.

Для поиска ББДТ применяется процедура построения матрицы импликаций [4, 5] — целочисленной матрицы $\mathbf{U}$, столбцы которой сопоставлены характеристическим признакам $z_1, z_2, \ldots, z_m$, а строки — всевозможным парам объектов v, l, соответственно из разных образов a, b (классов); $v \in \{1, 2, \ldots, \sigma(\mathbf{Q^a})\}$, $l \in \{1, 2, \ldots, \sigma(\mathbf{Q^b})\}$, где $\sigma(\mathbf{Q^a})$ ($\sigma(\mathbf{Q^b})$) — количество строк в подматрице $\mathbf{Q^a}$ ($\mathbf{Q^b}$) матрицы $\mathbf{Q}$. Строка $\mathbf{U}_i$ матрицы $\mathbf{U}$ представляет собой значение целочисленной вектор-функции различения, j-я ($j \in \{1, 2, \ldots, m\}$) компонента u_{ij} которой вычисляется по формуле:

$$u_{i,j} = |q^a_{v,j} - q^b_{l,j}|, \qquad (1)$$

где $q^a_{v,j}$ ($q^b_{l,j}$) — значение признака z_j для объекта v (l); $i = \prod\limits_{r=1}^{a} \sigma(\mathbf{Q}^r) \sum\limits_{s=r+1}^{b-1} \sigma(\mathbf{Q}^s) + \sum\limits_{r=1}^{v-1} \sigma(\mathbf{Q}^b) + vl$, а $u_{i,j}$ вычисляется для каждой пары образов.

Будем говорить, что строка $\mathbf{U}_d$ поглощает строку $\mathbf{U}_l$ ($\mathbf{U}_d \succ \mathbf{U}_l$), если

$$(\mathbf{U}_d \succ \mathbf{U}_l) \leftrightarrow \forall i \in I(u_{di} \geqslant u_{li}),$$

где $i \in \{1, \ldots, s\}$ — множество строк матрицы $\mathbf{U}$, и строки $\mathbf{U}_d$ и $\mathbf{U}_l$ несравнимы ($\mathbf{U}_d \neq \mathbf{U}_l$)

$$(\mathbf{U}_d \neq \mathbf{U}_l) \leftrightarrow (\mathbf{U}_d \not\succ \mathbf{U}_l)\ \&\ (\mathbf{U}_l \not\succ \mathbf{U}_d).$$

Безызбыточной матрицей импликаций (БМИ) назовем такую матрицу $\mathbf{U}'$, в которой отсутствуют поглощающие строки.

Отметим, что понятие БМИ для булевых [5] и k-значных признаков различаются, что приводит к необходимости модификации алгоритма выявления закономерностей, приведенного в статье [5].

Безызбыточным столбцовым покрытием (БСП) БМИ называется подмножество столбцов, покомпонентная сумма элементов которых равна столбцу, состоящему из ненулевых значений элементов и при исключении любого столбца из данного подмножества указанное свойство нарушается.

Каждое столбцовое покрытие БМИ задает полностью различающее подмножество признаков, состоящее из признаков, соответствующих столбцам, входящим в данное покрытие.

Анализ k-значных данных

Анализ k-значных данных сводится к выявлению закономерностей.

В целях сокращения перебора при выявлении закономерностей для больших размеров матриц $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}'$ предлагается ряд оптимизирующих преобразований, таких как построение сокращённых целочисленных матриц описания ($\mathbf{Q}'$), различений ($\mathbf{R}''$) и по матрицам $\mathbf{Q}'$ и $\mathbf{R}''$ сокращённой БМИ ($\mathbf{U}''$).

Отметим, что в практических целях целесообразно строить БМИ, секционированную по механизмам классификации [5].

Постановка задачи. Даны матрицы $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}$ в пространстве k-значных признаков.

Необходимо построить матрицу $\mathbf{U}''$, найти все её безызбыточные столбцовые покрытия и соответствующие множества k-значных ББДТ одновременно с выявлением других закономерностей.

По исходным матрицам $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}'$ построим матрицу $\mathbf{U}'$ одновременно с вычислением весовых коэффициентов признаков [5].

Построим матрицы $\mathbf{Q}'$ и $\mathbf{R}''$ по матрицам $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}'$. Каждый образ представим двумя строками матрицы $\mathbf{Q}'$. Каждую чётную (нечётную) строку $\mathbf{Q}'_i$ ($\mathbf{Q}'_f$) матрицы $\mathbf{Q}'$ представим целочисленным

вектором ($i = 2c$, $f = 2c-1$, $c \in \{1, \ldots, v\}$, v — количество образов), j-я ($j \in \{1, \ldots, m\}$) компонента которого соответствует максимальному (минимальному) значению j-го характеристического признака внутри каждого образа, и вычисляется по формуле:

$$q'_{i,j} = \max_l q^l{}_j(c), \tag{2}$$

$$q'_{f,j} = \min_l q^l{}_j(c), \tag{3}$$

где $q^l{}_j(c)$ — значение признака z_j для объекта $l \in \{1, \ldots, r_c\}$ из образа c, а r_c — количество объектов, принадлежащих образу c.

При этом сохраняется взаимнооднозначное соответствие между строками матриц $\mathbf{Q}'$ и $\mathbf{R}''$ такое же, как между строками матриц $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}'$.

Как указывалось ранее, в рамках рассматриваемой матричной модели не допускается пересечение описания образов, поэтому если при построении матрицы $\mathbf{Q}'$ строки из разных образов совпали, то для обеспечения непересечения образов предлагается использовать правило 1.

Правило 1: Если строка в матрице $\mathbf{Q}'$ из образа c совпадает со строкой из образа e ($c \neq e$), то заменяются все строки матриц $\mathbf{Q}'$ и $\mathbf{R}''$ из образов c, e строками матриц $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}'$ из образов c, e соответственно.

Отметим, что процесс применения правила 1 является итеративным и повторяется до тех пор, пока в матрице $\mathbf{Q}'$ не останется совпадающих строк из разных образов. При этом правило целесообразно применять только в случаях, когда количество совпадающих строк не превышает заданного числа g', зависимого от размерности и самих знаний, представленных матрицами $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}$. В противном случае мы не достигнем сокращения перебора.

Обозначим скорректированные матрицы через $\mathbf{Q}''$ и $\mathbf{R}'''$ соответственно и по ним построим матрицу $\mathbf{U}''$, строка $\mathbf{U}''_i$ которой представляет собой значение целочисленной вектор-функции различения, j-ю ($j \in \{1, \ldots, m\}$) компоненту $u''_{i,j}$ которой будем вычислять аналогично формуле 1.

По построенной матрице $\mathbf{U}''$ выявим закономерности с применением модифицированного алгоритма, основанного на алгоритмах [4, 6]. Модификация заключается в запоминании и удалении столбцов матрицы $\mathbf{U}''$, сопоставленных альтернативным (за исключением одного) и зависимым признакам при построении столбцовых покрытий матрицы $\mathbf{U}''$. В целях сокращения перебора при поиске БСП матрицы $\mathbf{U}''$, запоминаются и удаляются столбцы, сопоставленные признакам в разной степени различающие одни и те же объекты, за исключением одного, а также пара столбцов, покомпонентная сумма элементов которых не равна 0 при наличии столбца в матрице $\mathbf{U}''$, соответствующие элементы которого не равны 0, при равенстве 0 остальных элементов. Нахождение БСП матрицы $\mathbf{U}''$ будем продолжать до достижения количества найденых БСП величины g'', определяемой экспериментально.

При количестве найденных БСП, меньшем, чем g'', поглощаемые столбцы в матрице $\mathbf{U}''$, сопоставленные зависимым признакам и удалённые из матрицы $\mathbf{U}''$ при нахождении БСП, используются для поиска дополнительных БСП в целях принятия решения с заданной точностью.

Поскольку процедура оптимизации не является эквивалентным преобразованием, то возможно появление БСП матрицы $\mathbf{U}''$, не являющихся БСП матрицы $\mathbf{U}'$. В связи с этим необходимо проверить являются ли построенные БСП матрицы $\mathbf{U}''$ БСП для матрицы $\mathbf{U}'$.

Сформулируем правило 2 для нахождения и исключения тех БСП матрицы $\mathbf{U}''$, которые не являются БСП матрицы $\mathbf{U}'$.

Правило 2. Если покомпонентная сумма элементов столбцов матрицы $\mathbf{U}'$ j-го БСП, построенного по матрице $\mathbf{U}''$, будет содержать хотя бы один нулевой элемент, то j-й БСП для матрицы $\mathbf{U}''$ не является БСП для матрицы $\mathbf{U}'$.

По оставшимся после применения правила 2 БСП, построим ББДТ.

Далее приведём пример, иллюстрирующий поиск вышеупомянутых закономерностей.

Иллюстративный пример

Пусть заданы матрицы $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}$ (см. рис. 1). Упорядочим строки матриц $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}$ по принадлежности к образам (рис. 2).

$\boldsymbol{Q}=$

z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6	z_7	z_8	
3	4	8	9	5	1	3	4	1
2	5	7	9	4	1	5	4	2
3	3	8	8	4	1	5	4	5
3	5	7	8	3	0	8	4	3
4	2	6	8	4	1	5	4	4
1	2	8	8	3	–	3	4	7
2	3	8	8	4	1	3	4	6
2	6	7	9	5	1	3	4	9
1	–	7	8	4	0	6	4	8
1	4	8	8	3	0	4	4	10

$\boldsymbol{R}=$

k_1	k_2
1	1
1	1
1	1
1	2
1	2
1	2
2	1
2	1
2	2
2	2

$\boldsymbol{R'}=$

1
1
1
2
2
2
3
3
4
4

Рис. 2. Матрицы описания и различений.

По матрицам $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}'$ построим матрицу $\mathbf{U}'$, пример которой не приводится, поскольку рамки статьи ограничены.

Определим константные и устойчивые признаки; признак z_8, равный 4-м, является константным; признаки $z_1^3 = 2$, $z_1^4 = 1$, $z_4^2 = 8$, $z_4^4 = 8$, $z_6^1 = 1$, $z_6^3 = 1$ и $z_6^4 = 0$ являются устойчивыми.

Удалив константный признак z_8 построим сокращенные матрицы $\mathbf{Q}'$ и $\mathbf{R}''$ (рис. 3). Заметим, что в матрице $\mathbf{Q}'$ совпали две строки: 1-я и 5-я, выделенные на рис. 3 полужирным шрифтом.

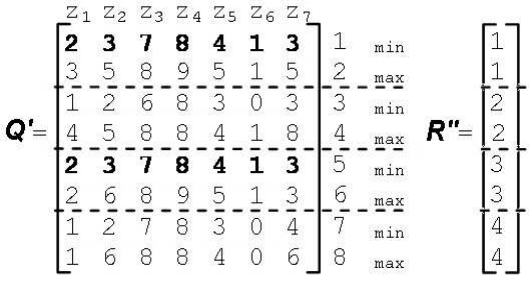


Рис. 3. Матрицы $\mathbf{Q}'$ и $\mathbf{R}''$.

Скорректируем матрицы $\mathbf{Q}'$ и $\mathbf{R}''$, применив правило 1 и обозначим их через $\mathbf{Q}''$ и $\mathbf{R}'''$ соответственно (рис. 4). Заменённые строки выделены полужирным шрифтом на рис. 4.

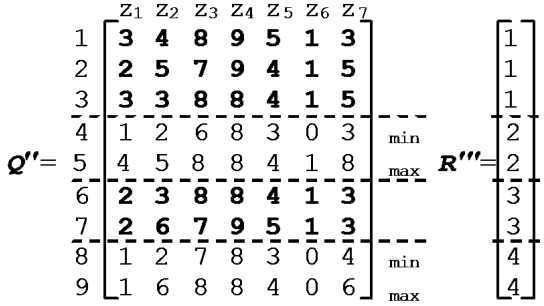


Рис. 4. Скорректированные матрицы $\mathbf{Q}''$ и $\mathbf{R}'''$.

Далее построим матрицу $\mathbf{U}''$ (рис. 5).

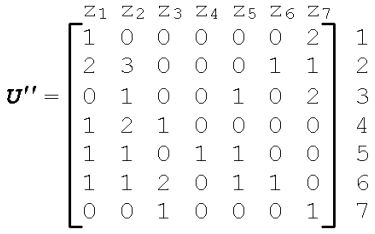


Рис. 5. Матрица $\mathbf{U}''$.

В результате выявления закономерностей получим: 1) признак z_4 — зависит от признаков z_1, z_2, z_5; 2) признак z_6 — зависит от признаков z_1, z_2; 3) признак z_6 — несущественный. Альтернативные и обязательные признаки отсутствуют.

Построим БСП матрицы $\mathbf{U}''$: $\{1;7\}$, $\{2;7\}$, $\{1;2;3\}$, $\{1;3;5\}$, $\{3;4;7\}$, $\{3;5;7\}$.

Проверим являются ли они БСП матрицы $\mathbf{U}'$ (правило 2). БСП матрицы $\mathbf{U}''$ $\{1;\,3;\,5\}$, $\{3;\,4;\,7\}$ не являются БСП матрицы $\mathbf{U}'$. Следовательно, при построении ББДТ они исключаются. По оставшимся БСП матрицы $\mathbf{U}''$ построим ББДТ. В результате получились следующие ББДТ: $T_1 = \{z_1, z_7\}$, $T_2 = \{z_2, z_7\}$, $T_3 = \{z_1, z_2, z_3\}$, $T_4 = \{z_3, z_5, z_7\}$.

Программная реализация

Алгоритм интеллектуального анализа k-значных данных реализован в виде динамически подключаемого модуля к интеллектуальному инструментальному средству ИМСЛОГ [6], на базе которого строятся прикладные интеллектуальные системы.

Модуль разработан на основе программной среды Borland C++ Builder. Входными данными модуля служат матрицы $\mathbf{Q}$ и $\mathbf{R}$. На выходе получаем выявленные закономерности, включая все ББДТ.

Библиотека классов модуля содержит математические объекты (k-значные векторы и матрицы), используемые в алгоритме, которые динамически создаются, обрабатываются и удаляются.

Заключение

Предложен оригинальный алгоритм интеллектуального анализа k-значных данных. Алгоритм позволяет производить построение ББДТ одновременно с выявлением других закономерностей, тем самым уменьшая временные и стоимостные затраты на их построение. Приведён иллюстративный пример, наглядно показывающий процесс выявления закономерностей и описана программная реализация предложенного алгоритма.

Исследование алгоритма на ряде псевдослучайных и реальных данных и знаний позволит выявить область его целесообразного использования.

Литература

[1] *Журавлёв Ю. И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Проблемы кибернетики: Вып. 33. Москва: Наука— 1978. — С. 5–68.

[2] *Загоруйко Н. Г.* Прикладные методы анализа данных и знаний— Н-ск: ИМ СО РАН, 1999. — 270 с.

[3] *Закревский А. Д.* Логика распознавания. Изд. 2-е, доп.— Москва: Едиториал УРСС, 2003. — 144 с.

[4] *Янковская А. Е.* Построение k-значных диагностических тестов в интеллектуальной системе с матричным представлением знаний // Сб. научн. труд. VI Национальной конф. по искусственному интеллекту с межд. уч. Т. I, Пущино, 1998. — С. 264–269.

[5] *Янковская А. Е.* Логические тесты и средства когнитивной графики в интеллектуальной системе // Новые информационные технологии в исследовании дискретных структур. Доклады 3-ей Всерос. конф. с междунар. участием, Томск: СО РАН, 2000. — С. 163–168.

[6] *Янковская А. Е., Гедике А. И.* Интеллектуальный анализ информации на базе инструментального средства ИСМЛОГ // Новости искусственного интеллекта. —2005.— № 1. — С. 36–47.

[7] *Дюкова Е. В.* О числе тупиковых покрытий целочисленной матрицы // Журнал вычислительной математики и математической физики. Том 45. – 2005.— № 5. — С. 935–940.

Анализ данных и знаний на основе конвергенции нескольких наук и научных направлений*

Янковская А. Е.
yank@tsuab.ru, ayyankov@gmail.com
Томск, Томский государственный архитектурно-строительный университет

Статья посвящена анализу данных и знаний, сводящемуся к выявлению закономерностей, включая диагностические тесты, на основе конвергенции нескольких наук и научных направлений: распознавание образов, дискретная математика, искусственный интеллект, теория автоматов, надежность, теория полезности, когнитивные средства. Приводится понятие данных и знаний, их анализ. Формулируются необходимые и достаточные, а также достаточные условия непротиворечивости данных и знаний и принятия решений, устойчивых к ошибкам измерения значений признаков. Фрагментарно излагаются предлагаемый подход и идея алгоритмов. Предлагается дальнейшее развитие данного подхода.

Analysis of data and knowledge on the basis of synergy of several sciences and scientific directions*

Yankovskaya A. Y.
Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russian Federation

The paper concerns analysis of data and knowledge, which considers revealing of regularities, including diagnostic tests, and represents result of synergy of several sciences and scientific directions: pattern recognition, discrete mathematics, artificial intelligence, automata theory, reliability, utility theory, and cognitive sciences. The definitions for data, knowledge, and their analysis are given. Necessary and sufficient, as well as sufficient conditions to consistency of data and knowledge and to decision making tolerant to features measurement errors are formulated. Fragments of the proposed approach and algorithms ideas are described, and directions for future development are proposed.

Введение

Разработка эффективных методов анализа данных и знаний (АДЗ) имеет большое значение, поскольку именно к ним в значительной степени сводится решение многих научных, образовательных, гуманитарных, естественных и технических задач, возникающих в различных проблемных и междисциплинарных областях. АДЗ применяется в интеллектуальных системах (ИС) с целью выявления различного рода закономерностей, используемых при принятии решений. Сильно ветвящиеся процессы анализа приводят к обширному перебору промежуточных вариантов, которые не всегда удаётся реализовать даже с использованием современных информационных технологий. Учёт различных требований, предъявляемых при принятии решений (минимизация признакового пространства; стоимости; ущерба (риска), наносимого при измерении значения признаков исследуемого объекта; обеспечение заданной надёжности и др.) приводит к их учёту в процессе выявления закономерностей при анализе данных и знаний. В связи с этим необходимо построить логическую цепочку АДЗ на основе конвергенции нескольких наук и научных направлений.

Под конвергенцией понимается взаимопроникновение нескольких наук и научных направлений. Будем считать, что чем больше взаимопроникновение, тем выше степень конвергенции.

Известно, что научные исследования на стыке наук позволяют получить синергетический эффект. Учёт сразу несколько требований приводит к необходимости применения согласованного совмещения совокупности отдельных предметов (нескольких наук): распознавание образов, дискретная математика, искусственный интеллект, надежность, теория автоматов, мягкие вычисления, теория вероятности и математическая статистика, теория полезности.

Наиболее важным средством АДЗ являются диагностические тесты (ДТ) [1, 2], которые в статьях [2–9] включены в состав закономерностей, используемых при принятии решений в ИС, основанных на методах тестового распознавания образов [2–13].

Таким образом основной путь развития эффективных методов АДЗ — это согласованное совместное применение вышеупомянутых наук и нескольких научных направлений: тестовое распознавание образов с использованием весовых коэффициентов признаков [2] и информационного веса [1]; отказоустойчивость [8] и вероятность ошибки [7]; генетические [10, 11] и логико-комбинаторно-вероятностные [4] алгоритмы; когнитивные средства, имеющие и неимеющие отображения в обычной реальности [2, 3] и другие. Именно этот путь нашёл отражение в настоящей статье, в которой предлагается конвергенция вышеупомянутых наук и научных

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-01-00462-а и проект № 09-01-99014-р_офи.

направлений при АДЗ, представленных в матричной форме и при выявлении различного рода закономерностей, включая ДТ.

Представление данных и знаний

Для АДЗ, начиная от их анализа на непротиворечивость, выявления различного рода закономерностей и кончая принятием решений в ИС, основанных на методах тестового распознавания образов, используется матричная модель представления данных и знаний, базирующаяся на понятиях и конструкциях теории дискретных автоматов [13].

Матричная модель представления данных и знаний в виде матрицы описаний, 3-х типов матриц различений и матицы переходов аналогична матрице кодирования внутренних состояний автомата, матрицам выходов и переходов соответственно, применяемых при проектировании САПР устройств логического проектирования [13], описываемых функциональными моделями асинхронных автоматов. Преимущество данной модели определяется возможностью использования объектов и методов дискретной математики, параллельной обработкой информации и применением одних и тех же ключевых алгоритмов на разных этапах реализации ИС тестового распознавания, начиная от анализа знаний на непротиворечивость, выявления закономерностей, включая ДТ, и кончая принятием решений.

Строки матрицы описаний $\mathbf{Q}$ сопоставляются объектам обучающей выборки из рассматриваемой проблемной области, столбцы — характеристическим признакам (ХП) (булевым и k-значным) $z_1, z_2, \ldots, z_m$, описывающим в совокупности каждый объект. Элемент q_{ij} матрицы $\mathbf{Q}$ задает значение j-го признака для i-го объекта. Строка q_i матрицы $\mathbf{Q}$ сопоставляется объекту s_i ($i \in \{1, \ldots, n\}$), где n — число обучающих объектов. Если у какого-либо объекта в матрице $\mathbf{Q}$ значение признака отмечено символом «–», то считается, что значение соответствующего признака безразлично (признак может принимать как нулевые, так и единичные значения, а в случае k-значных признаков — любые целочисленные значения признаков из заданного интервала значений признака). Считается, что интервал значений признака задается извне экспертом при описании знаний проблемной области.

Строки матрицы различений $\mathbf{R}$ сопоставляются одноименным строкам матрицы $\mathbf{Q}$, столбцы — уровням различения, в качестве которых выступают классификационные признаки, определяющие различные механизмы разбиения объектов на классы эквивалентности (механизмы классификации). Элемент r_{ij} матрицы $\mathbf{R}$ задает принадлежность i-го объекта одному из выделенных классов по j-му механизму классификации. Для указания факта принадлежности объекта классу используется номер этого класса. Множество всех неповторяющихся строк матрицы различений сопоставлено множеству выделенных образов. Элементами образа являются объекты, представленные строками матрицы описаний, сопоставленными одинаковым строкам матрицы различений.

Строка матрицы $\mathbf{R}$ задает обобщенный класс (образ). Если имеется единственный механизм классификации, матрица различений вырождается в столбец, а обобщенный класс превращается в класс, что соответствует традиционному представлению знаний в задачах распознавания образов.

С содержательной точки зрения матрицы различений могут быть любого из следующих трех типов. Первый тип ($\mathbf{R_1}$) характеризуется вложенностью механизмов классификации, когда каждый последующий столбец задает более подробное разбиение объектов на классы эквивалентности. Второй тип ($\mathbf{R_2}$) может интерпретироваться как совокупность действий (например, организационно-управляющих), которые необходимо выполнить для данного объекта (в данной ситуации). Третий тип ($\mathbf{R_3}$) служит для представления независимых механизмов классификации, где столбцы отражают, например, мнения различных экспертов.

Матрица $\mathbf{P}$ отражает динамику процесса. К сожалению, рамки статьи не позволяют представить описание матрицы $\mathbf{P}$.

Данная модель позволяет представлять не только данные, но и знания экспертов, поскольку одной строкой матрицы $\mathbf{Q}$ можно задавать в интервальной форме подмножество объектов, для которых характерны одни и те же итоговые решения, задаваемые соответствующими строками матрицы $\mathbf{R}$.

Анализ данных и знаний

При анализе данных и знаний мы будем опираться на понятие закономерностей, введённое в [2] и расширенное новыми видами закономерностей, а именно, сигнальными признаками [6].

Под закономерностями понимаются подмножества признаков с определёнными легко интерпретируемыми свойствами, влияющими на различимость объектов из разных образов, устойчиво наблюдаемыми для объектов из обучающей выборки и проявляющимися на других объектах той же природы, а также весовые коэффициенты признаков, характеризующие их индивидуальный вклад в различимость объектов. К упомянутым подмножествам будем относить константные, устойчивые (константные внутри образа), неинформативные (не различающие ни одной пары объектов), альтернативные (в смысле включения в ДТ), зависимые (в смысле включения подмножеств различимых пар объектов), несущественные (не входящие ни в один безызбыточный ДТ), обязательные

(входящие во все безызбыточные ДТ), псевдообязательные (входящие в множество используемых при распознавании безызбыточных ДТ, но не являющиеся обязательными) признаки, сигнальные признаки 1-го рода (минимальные подмножества ХП, различающие объекты, принадлежащие к двум разным классам (образам)), а также все минимальные и все (либо часть — при большом признаковом пространстве) безызбыточные различающие подмножества признаков, являющиеся, по сути, соответственно минимальными и безызбыточными (тупиковыми [1]) ДТ. Диагностические тесты позволяют отнести распознаваемый (исследуемый) объект к одному из классов при фиксированном механизме классификации (образов). При распознавании в число закономерностей включаются сигнальные признаки 2-го рода (минимальные подмножества ХП, различающие описание исследуемого (распознаваемого) объекта, принадлежащего одному классу (образу) от описания объектов, принадлежащих другому классу (образу)).

Если одним из требований к принятию решений является учёт надёжности, то при выявлении закономерностей оно трансформируется к необходимости построения отказоустойчивых ДТ, т. е. тестов, устойчивых к заданному числу ошибок измерения (занесения) ХП, или ДТ, приводящих к минимальной вероятности ошибки при принятии решений.

Для выявления закономерностей, включая ДТ, используется целочисленная матрица импликаций $\mathbf{U}$, столбцы которой сопоставлены характеристическим признакам $z_1, z_2, \ldots, z_m$, а строки — всевозможным парам объектов v, l, соответственно из разных классов a, b при фиксированном механизме классификации (образов); $v \in \{1, 2, \ldots, \sigma(\mathbf{Q}^a)\}$, $l \in \{1, 2, \ldots, \sigma(\mathbf{Q}^b)\}$, где $\sigma(\mathbf{Q}^a)$ (или $\sigma(\mathbf{Q}^b)$) — количество строк в подматрице $\mathbf{Q}^a$ (или $\mathbf{Q}^b$) матрицы $\mathbf{Q}$. Строка $\mathbf{U}_i$ матрицы $\mathbf{U}$ представляет собой значение целочисленной вектор-функции различения, j-я ($j \in \{1, 2, \ldots, m\}$) компонента u_{ij} которой вычисляется по формуле:

$$u_{i,j} = |q^a_{v,j} - q^b_{l,j}|, \qquad (1)$$

где $q^a_{v,j}$ (или $q^b_{l,j}$) — значение признака z_j для объекта v (или l), а $u_{i,j}$ вычисляется для каждой пары классов.

Отметим, что если один из признаков или оба признака принимают значение «–», то результат операции (формулы (1)) равен 0.

Обозначим через $f(\mathbf{U}_i)$ количество ненулевых элементов в строке $\mathbf{U}_i$. Сформулируем необходимое и достаточное, а также достаточное условия непротиворечивости данных и знаний и устойчивости ДТ к числу, не превышающему t, ошибок измерения (занесения) ХП.

Теорема 1. *Для обеспечения непротиворечивости данных и знаний и принятия решения, устойчивого к числу, не превышающему t, ошибок измерения (занесения) ХП, в матрице $\mathbf{Q}$ для каждой пары объектов из разных классов при фиксированном механизме классификации необходимо и достаточно обеспечение условия $f(\mathbf{U}_i) \leqslant h (h = t + 2)$ для любой строки $\mathbf{U}_i$ матрицы $\mathbf{U}$.*

Для формулировки достаточного условия обеспечения непротиворечивости данных и знаний и принятия решения, устойчивого к числу, не превышающему t, ошибок измерения, воспользуемся матрицей импликаций, построенной на основе рассмотрения пар объектов и обозначаемой далее также через $\mathbf{U}$.

Следствие 1. *Замена в утверждении теоремы анализа каждой пары объектов из разных классов при рассматриваемом механизме классификации на анализ каждой пары объектов из разных образов (образ–образ, объект–образ, объект–объект) не нарушает её достаточности при построении матрицы импликаций на основе образов.*

Поскольку рамки статьи не позволяют даже фрагментарно изложить алгоритм АДЗ, представим в общем виде предлагаемый к АДЗ подход, состоящий из следующих этапов.

1. Адаптивное перекодирование (с использованием методов теории вероятности, математической статистики и знаний экспертов) ХП различного типа (количественных, номинальных, порядковых) при большом разбросе значений ХП с целью максимального разделения классов (образов) и приведения к виду, используемому в матричной модели представления данных и знаний.

2. АДЗ на непротиворечивость (проверка попарного пересечения описаний объектов из разных классов по каждому механизму классификации (образов) с применением методов дискретной математики, искусственного интеллекта, надёжности (при обнаружении противоречивости дополнения базы знаний)).

3. Выявление репрезентативности знаний двумя способами: логико-комбинаторным с глубокими оптимизирующими преобразованиями и статистическим на основе дивергенции информации Кульбака; оценка (на основе дивергенции Кульбака) дополнительного объема обучающих знаний в целях получения надежных выводов.

4. Построение с применением методов дискретной математики и с учётом предъявляемых требований к надёжности безызбыточной матрицы импликаций $\mathbf{U}'$ (с одновременным выявлением константных, устойчивых, неинформативных, обязательных, альтернативных и зависимых признаков и вычислением весовых коэффициентов всех при-

знаков на основе разделяющей способности признаков [2] и их информационного веса [1]).

5. Нахождение всех h-кратных кратчайших (всех либо части h-кратных безызбыточных) столбцовых покрытий матрицы $\mathbf{U}'$, каждому из которых соответствует минимальное (безызбыточное) различающее подмножество признаков (минимальный (безызбыточный) отказоустойчивый ДТ). Построение всех отказоустойчивых минимальных (всех либо части безызбыточных) безусловных и смешанных ДТ, представляющих собой оптимальное сочетание безусловных и условных составляющих.

6. Выбор оптимального подмножества отказоустойчивых ДТ ($\mathbf{N}_0$), удовлетворяющих заданным требованиям, сформулированных в виде критериев оптимальности:

1) $\mathbf{N}_0$ должно содержать максимальное число псевдообязательных признаков;
2) $\mathbf{N}_0$ должно содержать минимальное общее число признаков;
3) $\mathbf{N}_0$ должно содержать минимальное общее число сигнальных признаков 1-го рода для всех пар образов;
4) $\mathbf{N}_0$ должно содержать минимальное общее число подмножеств сигнальных признаков 1-го рода для всех пар объектов (образов);
5) $\mathbf{N}_0$ должно иметь максимальный суммарный вес по разделяющей способности признаков [2];
6) $\mathbf{N}_0$ должно содержать максимальный суммарный вес (информационный вес [1]);
7) $\mathbf{N}_0$ должно иметь наименьшую суммарную стоимость [11, 12];
8) $\mathbf{N}_0$ должно обеспечивать наименьший ущерб (риск) при выявлении значений признаков.

Выбор оптимального подмножества ДТ осуществляется на основе трёх алгоритмов (логико-комбинаторный алгоритм [12], алгоритм на основе метода анализа иерархий и генетический алгоритм [11]), обеспечивающих выполнение этих критериев и сравнительного анализа результатов, полученных по трём алгоритмам.

Заключение

Предложено использование конвергенции наук и научных направлений для АДЗ. Изложен предлагаемый подход и перечислены основные используемые при этом эффективные алгоритмы, разработанные с применением разделов из вышеперечисленных наук и научных направлений.

Дальнейшее развитие подхода связано со сравнительными исследованиями программно реализованных алгоритмов, включённых в интеллектуальное инструментальное средство ИМСЛОГ [5], и повышения степени конвергенции наук и научных направлений при анализе данных и знаний.

Литература

[1] *Журавлев Ю. И.* Распознавание образов и анализ изображений // Искусств. интеллект — В 3-х кн. Кн 2. Модели и методы / Под ред. Д. А. Поспелова. М.: Радио и связь, 1990. — С. 149–191.

[2] *Янковская А. Е.* Логические тесты и средства когнитивной графики в интеллектуальной системе // Новые информационные технологии в исследовании дискретных структур. Докл. 3-й Всерос. конф. Томск: СО РАН, 2000. — С. 163–168.

[3] *Yankovskaya A. E.* An automaton model, fuzzy logic, and means of cognitive graphics in the solution of forecast problems // Pattern Recognition and Image Analysis, 1998. — Vol. 8.— № 2. — Pp. 154–156.

[4] *Yankovskaya A. E.* Logic-combinational probabilistic recognition algorithms // Pattern Rec. and Image Analysis, 2001. — Vol. 11, — № 1. — Pp. 123–126.

[5] *Янковская А. Е., Гедике А. И.* Интеллектуальный анализ информации на базе инструментального средства ИМСЛОГ // Новости искусственного интеллекта. — 2005.— № 1. — С. 36–47.

[6] *Yankovskaya A. E, Ametov R. V.* Subsystem of signal features revealing based on test methods of pattern recognition // 8th Intl. conf. PRIA, Yoshkar-Ola, Russia, 2007. — Vol. 3. — Pp. 20–23.

[7] *Колесникова С. Н., Янковская А. Е.* Оценка значимости признаков для тестов в интеллектуальных системах // Известия РАН. Теория и системы управления, 2008. — № 6. — С. 135–148.

[8] *Янковская А. Е.* Принятие решений, устойчивых к ошибкам измерения значений признаков в интеллектуальных системах // Искусственный интеллект. Интеллектуальные системы. X Межд. н.-тех. конф. Таганрог: ТТИ ЮФУ, 2009. — С. 127–129.

[9] *Yankovskaya A., Gedike A.* Construction of the mixed diagnostic tests on optimal subset of the unconditional diagnostics tests in intelligent pattern recognition // Pattern Recognition and Image Analysis, 2009. — Vol. 19, — No. 4. — Pp. 575–582.

[10] *Yankovskaya A. E, Bleikher A. M.* Optimization of tests synthesis on the base of descent algorithms with the use of genetic transformations // Radioelectronics & Informatics, 2003. — No. 3, Vol. 24. — Pp. 51–55.

[11] *Yankovskaya A. E, Tsoy Y. R.* Selection of optimal set of diagnostic tests with use of evolutionary approach in intelligent systems // 5th EUSFLAT conf. New Dimensions in Fuzzy Logic and Related Technologies. — Vol. 2. — Ostrava, Chech Republic, 2007. — Pp. 267–270.

[12] *Янковская А. Е., Петелин А. Е.* Ускоренный многокритериальный выбор оптимального подмножества диагностических тестов // Системный анализ и информационные технологии (САИТ–2009). 3-я Межд. конф. — М., 2009. — С. 366–373.

[13] *Янковская А. Е.* Алгоритмы спуска при решении некоторых задач синтеза дискретных устройств и их приложения // Теория дискретных управляющих устройств. М.: Наука, 1982. — С. 206–214.

About hybrid algorithm for tuning of parameters in approximation based on linear expansions in parametric functions

Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V.
burnaev@iitp.ru, belyaevmichel@gmail.com, prikhodkop@gmail.com
IITP, Moscow, Russia

Method for construction of approximation of unknown multidimensional dependency based on data sample is proposed. Approximation is constructed in the class of linear expansions in parametric functions from the dictionary. Parameters of the functions from the dictionary are tuned using gradient methods and expansion coefficients are calculated using adaptively regularized method of least squares. Regularization is used to increase the stability of iterative tuning of parameters. For additional improvement of stability/increase of generalization ability of approximation specially developed method for boosting is used.

Об алгоритме настройки параметров аппроксимации на основе разложения по словарю параметрических функций

Бурнаев Е. В., Беляев М. Г., Приходько П. В.
Москва, ИППИ РАН

В работе предложен метод построения аппроксимации неизвестной многомерной зависимости на основе данных. Аппроксимация строится в классе линейных разложений по словарю параметрических функций. Параметры функций из словаря подстраиваются на основе градиентных методов, в свою очередь коэффициенты разложения по этим функциям подсчитываются на основе метода наименьших квадратов с адаптивной регуляризацией. Регуляризация используется для увеличения стабильности процесса итеративной подстройки параметров. Для дополнительного увеличения стабильности/улучшения обобщающей способности аппроксимации предложен метод бустинга.

Introduction

Problem of function approximation is the main element of metamodel construction on basis of data [9, 2]. Typical models for approximation are based on linear expansions in parametric functions (cf. Artificial Neural Networks, Radial Basis Functions etc. [10]). However methods for tuning of parameters of such models have numerous shortcomings mainly due to not taking into account special structure of the models (for example, in case of Artificial Neural Networks it is not taken into account that the model for approximation depends on output layer weights linearly) and are mostly based on gradient descent which has slow convergence, can get stuck in the bad local minimum of the error function etc.

The aim of the present work is to describe new methodology for high dimensional function approximation (HDA) based on an expansion in the parametric functions from the given dictionary. This methodology consists of special initialization techniques for parameters of functions from the dictionary, hybrid algorithm for tuning these parameters which takes into account the structure of the model, and specially developed boosting method for additional increase of generalization ability of approximation. The proposed methodology originates from the papers [1, 4].

Problem statement

In general the problem can be formulated as follows. Let $f(X)$ be some unknown function with input $X \in \mathbf{X} \subset \mathbb{R}^m$ and output $Y = f(X) \in \mathbb{R}^1$. Let $D_{\text{learn}} = \{(X_i, Y_i = f(X_i)),\ i = 1, \ldots, N_{\text{learn}}\}$ be learning sample. The problem is to construct an approximation $\hat{Y} = \hat{f}(X) = \hat{f}(X \,|\, D_{\text{learn}})$ (approximator) for the initial dependence $Y = f(X)$ using the set D_{learn}.

If for all $X \in \mathbf{X}$ (not only for $X \in D_{\text{learn}}$) an approximate equality $f(X) \approx \hat{f}(X)$ takes place then the approximator $\hat{f}(X)$ is considered to be appropriate. This fact is approximately checked using independent testing sample.

Quality of the constructed approximation is estimated by the mean error of approximation on the test set D_{test}:

$$\varepsilon\big(\hat{f} \,|\, D_{\text{test}}\big) = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{test}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{test}}} \big(Y_i - \hat{f}(X_i)\big)^2}.$$

Model of an approximator

One of the main approaches for global modelling of an unknown function is so-called basis expansion using functions from the specified dictionary, i.e.

$$\hat{f}(X) = \sum_{j=1}^{p} \alpha_j \psi_j(X), \tag{1}$$

where $\psi_j(X)$, $j = 1, \ldots, p$ are some parametric functions. We will use three main and widely used classes of parametric functions, namely

1. Sigmoid basis function $\psi_j(X) = \sigma\Big(\sum_{i=1}^{m} \beta_{j,i} x_i\Big)$, where $X = (x_1, \ldots, x_m)$, $\sigma(x) = \frac{e^x - 1}{e^x + 1}$.

2. Radial basis functions $\psi_j(X) = \exp\left(-\frac{\|X-d_j\|_2^2}{\sigma_j^2}\right)$.
3. Linear basis functions $\psi_j(X) = x_j$, $j = 1, \ldots, m$, $X = (x_1, \ldots, x_m)$.

Thus, the index set $J = \{1, \ldots, p\}$ can be decomposed into tree sets $J = J_{\text{lin}} \cup J_{\text{sigmoid}} \cup J_{\text{RBF}}$, where $J_{\text{lin}} = \{1, \ldots, m\}$ corresponds to the linear functions, J_{sigmoid} and J_{RBF} correspond to sigmoid and radial functions correspondingly. Therefore in order to fit the model (1) to the data we should choose cardinality of the sets J_{lin}, J_{sigmoid}, J_{RBF} and tune the unknown parameters.

Hybrid Learning Algorithm

Usually in order to fit the model of type (1) to the data simple gradient descent methods are used for adjustment of its parameters. However, as it is well-known, such methods have slow convergence. Several techniques have been developed to speed up this method, such as, among others, second order algorithms, adaptive step size methods, appropriate weights initialization etc [10]. In this section hybrid learning algorithm is described based on Regression Analysis and two types of gradient optimization methods — so called Resilient Propagation [14] method and Levenberg-Marquardt method [14]. The use of Regression Analysis allows considerable decrease of the learning time. This effect can be explained by the fact that on each iteration of the hybrid algorithm the obtained values of the decomposition coefficients α_j, $j = = 1, \ldots, p$ are optimal. Any iterative estimation algorithm (and proposed hybrid algorithm is not exception) should be initialized. In the following subsections methods for initialization of sigmoid and radial basis functions are proposed.

Initialization of radial basis functions

Parameters of the radial basis functions are initialized in the first place. For this elastic net is used [10] which allows not only regularization of the obtained estimates of the parameters but also consistently selects input vectors from the train set D_{train} which will be used as centers for radial basis functions. The following algorithm is proposed:

1. Divide randomly the learning data set D_{learn} into train set D_{train} and validation set D_{val} of sizes N_{train} and N_{val} correspondingly.
2. Estimate σ^2 as the mean squared pairwise distance between points from D_{train}.
3. Initialize the values of d_j, $j \in J_{\text{RBF}}$ by the values of X, $X \in D_{\text{train}}$.
4. For each $\lambda_1 \geqslant 0$ and $\lambda_2 \in [1, 2]$ from some predefined greed solve the following optimization problem (elastic net):

$$\sum_{\{Y,X\} \in D_{\text{train}}} \left(Y - \sum_{j \in J_{\text{lin}} \cup J_{\text{RBF}}} \alpha_j \psi_j(X)\right)^2 + \\ + \lambda_1 \left((2-\lambda_2) \sum_{j \in J_{\text{lin}} \cup J_{\text{RBF}}} |\alpha_j| + (\lambda_2 - 1)\frac{\alpha_j^2}{2}\right) \to \\ \to \min_{\alpha_j, j \in J_{\text{lin}} \cup J_{\text{RBF}}},$$

where $\psi_j(X)$ are radial basis functions with $\sigma_j = \sigma$ for $j \in J_{\text{RBF}}$. The solution of such optimization problem for sufficiently big value of λ_1 and $\lambda_2 < 2$ is sparse and a lot of coefficients α_j, $j \in J_{\text{lin}} \cup J_{\text{RBF}}$ will be zero (the value of the L_1-regularization coefficient λ_1 defines the number of nonzero parameters α_j while the value of the L_2-regularization coefficient λ_2 defines the extent to which nonzero parameters α_j are shrunk towards zero). Therefore only small part of the inputs from the training sample will be used as centers for radial basis functions.
5. Choose among the obtained solutions such that give the smallest error on the validation set D_{val}.

Initialization of sigmoid basis functions

According to modern terminology the sum of type $\sum_{j \in J_{\text{sigmoid}}} \alpha_j \psi_j(X)$ is linear combination of functions of the type planar wave. From [12] it follows that coefficients β_j in sigmoid functions

$$\psi_j(X) = \sigma\left(\sum_{i=1}^{m} \beta_{j,i} x_i\right), \quad j \in J_{\text{sigmoid}},$$

should be initialized in a such way that collapse effect of wave vectors β_j, $j \in J_{\text{sigmoid}}$ does not take place. For this the following scheme was proposed:

1. Reparametrize vectors β_j, $j \in J_{\text{sigmoid}}$ using spherical coordinates $\varphi_j \in [0, 2\pi]^{m-1}$.
2. Generate vectors $\varphi_j \in [0, 2\pi]^{m-1}$, $j \in J_{\text{sigmoid}}$ using Space-filling Latin Hypercubes [9].
3. Generate wave vectors β_j, $j \in J_{\text{sigmoid}}$ on the unit sphere $\mathbf{S}^{m-1}$ using spherical coordinates and then scale each vector using normalization coefficient randomly generated by the method SCAWI [13].

Proposed method allows to generate less correlate vectors β_j, $j \in J_{\text{sigmoid}}$ and after learning obtain better quality of approximation compared to well-known initialization methods, for example, SCAWI, Nguen-Widrow [13] etc. The number of sigmoid basis functions, i. e. the cardinality of the set J_{sigmoid} can be estimated using statistical learning theory, see the description of algorithm in [5].

Description of iterative estimation algorithm

Let us now describe how methods of Regression Analysis can be used to estimate the parameters of

the model (1). At this step obtained subsets D_{train} and D_{val} are used for parameter estimation of $\hat{f}(X)$ and control of generalization ability of $\hat{f}(X)$ correspondingly. It is obvious that the minimization of the error $\varepsilon\big(\hat{f} \,|\, D_{\text{train}}\big)$ can be done explicitly over the parameters α_j, $j = 1, \ldots, p$ using least squares estimate for some fixed values of the parameters of basis functions $\psi_j(X)$, $j = m+1, \ldots, p$. For fixed values of the parameters α_j, $j = 1, \ldots, p$ parameters of basis functions $\psi_j(X)$, $j = m+1, \ldots, p$ can be adapted using any gradient descent method. In order to get rough adaptation we use Resilient Propagation (see [14]). After application of Resilient Propagation more accurate adaptation of parameters can be done using second-order gradient methods like [14].

The following iterative hybrid learning algorithm can be described as follows:

1. The weights of basis functions $\psi_j(X)$, $j = m+1, \ldots, p$ are initialized (see previous subsections). The weights α_j, $j = 1, \ldots, p$ are calculated using least squares.
2. The following two main steps are done during each iteration of the algorithm:
   a) The weights of basis functions $\psi_j(X)$, $j = m+1, \ldots, p$ are adjusted using any gradient descent method. In fact several different methods can be used one-by-one.
   b) The weights α_j, $j = 1, \ldots, p$ are calculated using ridge regression. On each iteration of the algorithm the regularization parameter is increased if the condition number of the corresponding regression matrix is big. Otherwise the regularization parameter is decreased (see details of algorithm for adaptive regularization in [6]).
3. If for the user-defined number of consecutive iterations the error on the set D_{val} does not decrease below its current minimal value and/or one of the stopping criteria of gradient descent is fulfilled the hybrid learning algorithm is stopped. It may happen that error on the validation set D_{val} is increased since the value of the regularization parameter is selected too big. In such case the reason for error increase is identified and the regularization parameter is adjusted accordingly (see details of algorithm for adaptive regularization in [6]).

In fact several different variants of gradient based minimization algorithms can be used for such framework. Each algorithm is started after the previous has stopped. We propose to use Resilient Propagation [14] for rough adjustment of parameters and then Levenberg-Marquardt algorithm [14] for accurate adjustment.

Ensemble of approximators

Proposed hybrid learning algorithm outperforms standard algorithms (see [10, 14]) in accuracy (and sometimes in time when accurate adjustment using Levenberg-Marquardt method is not activated during learning) [1, 3, 4, 11, 6]. However the hybrid algorithm has typical shortcomings of standard learning algorithms, namely the result depends on the initialization, only part of the learning data is used for weights adjustment, the division of D_{learn} into D_{train} and D_{val} is random. In order to smooth over the influence of these random effects we propose to construct ensemble on basis of specially elaborated algorithm, based on ideas of boosting and bagging methods (see [10]). This algorithm can be described as follows [7]:

1. Let the initial output of the ensemble be equal to $F_0(X) = 0$.
2. For $B = 1, 2, \ldots$:
   a) Define a new sample $D_{\text{learn},B} = \{Y^B, X\}$, where $Y^B = B \cdot Y - (B-1) \cdot F_{B-1}(X)$ for $\{Y, X\} \in D_{\text{learn}}$.
   b) Train the B-th approximator $f_B(X)$ of the ensemble using the sample $D_{\text{learn},B}$ and the hybrid learning algorithm.
   c) The output of the ensemble is set to
   $$F_B(X) = \frac{B-1}{B} \cdot F_{B-1}(X) + \frac{1}{B} \cdot f_B(X).$$
   d) The algorithm for ensemble construction is stopped if for the user-defined number of iterations the error $\varepsilon\big(\hat{f} \,|\, D_{\text{learn}}\big)$ does not decrease below its current minimal value. Otherwise continue.

Usage of the proposed algorithm for ensemble construction enables us to adapt to the whole learning set D_{learn}, decrease the random variations (induced by random weights initialization and random learning set splitting) since the output of the ensemble is $F_B(X) = \frac{1}{B}\sum_{i=1}^{B} f_B(X)$ and decrease the bias since each new approximator in the ensemble will correct the errors of the previous approximators. In order to additionally decrease the possibility of bad initialization multistart is used on each iteration of boosting algorithm.

Experimental comparison

Results of comparison of the proposed algorithm HDA with conventional algorithms for approximation (Artificial Neural Networks — ANN, Radial Basis Function Network – RBF, Kriging, Linear Regression — LR) are presented here.

For comparison well-known Concrete Compressive Strength benchmark from UCI Machine Learning Repository[1] and Ackley test function from GDR MASCOT-NUM Toy Functions benchmark[2] were

[1] http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Concrete+Compressive+Strength

[2] http://www.gdr-mascotnum.fr/doku.php

Table 1. Errors of approximation for Concrete Compressive Strength benchmark.

Error	HDA	ANN	RBF	Kriging	LR
E_{mean}	3.00	5.10	3.85	10.80	8.19
$E_{Q(0.95)}$	8.75	20.21	12.63	28.95	20.85

Table 2. Errors of approximation for Ackley test function.

Error	HDA	ANN	RBF	Kriging	LR
E_{mean}	0.015	0.023	0.025	0.041	0.443
$E_{Q(0.95)}$	0.042	0.065	0.087	0.147	1.010

used. For the first test dataset was randomly divided into learning and testing samples of sizes 800 and 230 correspondingly. For the second test learning and testing samples of sizes 2000 and 1000 correspondingly were generated for uniformly randomly distributed 4-dimensional inputs. Well-known software package for metamodelling modeFRONTIER[3] was used for construction of approximators using conventional methods mentioned above.

In order to compare different approximation techniques we use two type of errors: mean absolute error E_{mean} and 95%-quantile absolute error $E_{Q(0.95)}$ (maximal absolute error after deleting of 5% of data points with maximal absolute errors). It can be seen from the tables 1 and 2 that proposed method HDA significantly outperforms all other conventional methods.

Experimental comparison of the proposed approach HDA with conventional methods for other data sources can be found in [1, 3, 4, 11, 6, 7]. Testing of the proposed method showed its superiority compared to conventional methods.

Conclusions

New methodology for high dimensional function approximation (HDA) based on an expansion in the parametric functions from the given dictionary is proposed. As opposed to conventional methods for approximation no external parameters (like the number of hidden layers in ANN etc.) should be set up in order to use the proposed methodology, i.e. it is fully automated and an ordinary engineer without knowledge of machine learning techniques can use it for construction of surrogate models [9]. Experimental comparison showed superiority of the proposed methodology compared to conventional methods both in terms of accuracy, time and computing intensiveness. Further development can be integration of a procedure for dimension reduction of input vectors [8] into proposed methodology.

[3] http://www.esteco.com/

References

[1] *Bernstein A. V., Burnaev E. V., Kuleshov A. P.* On a methodology for constructing approximations of multidimensional dependences // Proc. of the 4th Intl. Conf. PACO-2008, Moscow, 2008. — Pp. 56–62.

[2] *Bernstein A. V., Burnaev E. V., Kuleshov A. P.* Intellectual data analysis in metamodeling // Proc. of XVII All-Russian Seminar "Neuroinformatics and its applications to Data Analysis". Krasnoyarsk, 2009. — Pp. 23–28.

[3] *Burnaev E. V., Grihon S.* Construction of the metamodeles in support of stiffened panel optimization // Proc. of the VI Intl. Conf. MMR-2009, Moscow, 2009. — Pp. 124–128.

[4] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V., Chernova S. S.* Neural approximation based on regression and boosting // Proc. of the VI Intl. Conf. MMR-2009, Moscow, 2009. — Pp. 119-123.

[5] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Lokot A. S.* Model selection in function approximation problem based on statistical learning theory // Proc. of 9th Intl. Conf. Computer Data Analysis and Modeling: Complex Stochastic Data and Systems, Minsk, Belarus, 2010.

[6] *Burnaev E. V., Belyaev M. G.* Adaptive regularization in the problem of approximation of multidimensional dependencies // Proc. of Conf. "Information Technologies and Systems", Moscow, 2009. — Pp. 431–435.

[7] *Burnaev E. V., Prihodko P. V.* About boosting methods // Proc. of Conf. "Information Technologies and Systems", Moscow, 2009. — Pp. 422–427.

[8] *Burnaev E. V., Prihodko P. V.* Dimension reduction for function approximation based on piecewise-linear regression // Proc. of 8th Intl. Conf. Intelligent Information Processing. — 2010. — Pp. 204–207 (in this book).

[9] *Forrester A., Sobester A., Keane A.* Engineering design via surrogate modelling. A practical guide. — Wiley, 2008. — 238 p.

[10] *Hastie T., Tibshirani R., Friedman J.* The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction. — Springer, 2008. — 763 p.

[11] *Kuleshov A. P., Bernstein A. V., Burnaev E. V.* Metamodelling with using domain-specific knowledge // Proc. of 8th Intelligent Information Processing. — 2010. — Pp. 208–211 (in this book).

[12] *Maiorov V. E., Oskolkov K. I., Temlyakov V. N.* Gridge approximation and Radon compass // Bojanov B., eds. Approximation Theory: A volume dedicated to B. Sendov. — 2002. — Pp. 284–309. DARBA, Sofia.

[13] *Fernández-Redondo M., Hernández-Espinosa C.* Weight initialization methods for multilayer feedforward // ESANN'2001 proceedings. — 2001. — Pp. 119–124.

[14] *Tarhov D. A.* Neural networks. Models and algorithms. Vol. 18. — Moscow: Radio Engineering, 2005. (In Russian)

Dimension reduction for function approximation based on piecewise-linear regression

Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V.
burnaev@iitp.ru, belyaevmichel@gmail.com, prikhodkop@gmail.com
IITP, Moscow, Russia

Construction of approximation in the input space with reduced dimension allows reducing the error of approximation since more complex regression model can be used without over-fitting. In the present work method for dimension reduction of input vectors before construction of an approximation is proposed. This method allows preserving proximity between the values of the approximable function for initial input vectors and corresponding recovered input vectors. Application of the method to real and artificial data shows good performance in terms of run-time and accuracy.

Снижение размерности на основе кусочно-линейной регрессии в задаче аппроксимации

Бурнаев Е. В., Беляев М. Г., Приходько П. В.
Москва, ИППИ РАН

Снижение размерности вектора аргументов аппроксимируемой функции позволяет подгонять к данным более сложные регрессионные модели без переобучения и, как следствие, получать более низкую ошибку аппроксимации. В настоящей работе предложена такая процедура снижения размерности, которая при сжатии вектора аргументов учитывает поведение аппроксимируемой функции. Эффективность метода (в терминах ошибки аппроксимации и времени вычисления) продемонстрирована как на искусственных, так и на реальных данных

Introduction

Let y and X be respectively $\mathbb{R}$-valued and $\mathbb{R}^D$-valued random variables. Since usually any prior knowledge about the relationship between y and X is unavailable nonparametric approaches are used to model the regression function $f(x) = \mathsf{E}(y \mid X = x)$.

When the dimension of X is high it is very important to find the relationship between y and X efficiently in order to approximate $f(x)$ by a function having simplifying structure. In such case estimation and interpretation are possible even for moderate sample sizes. Main approach to model the dependency $f(x)$ efficiently is largely concerned with dimension reduction and can be formulated as follows [4].

Let us suppose that the following regression-type model for dimension reduction holds

$$y = f(B_0 X) + \varepsilon, \tag{1}$$

where f is an unknown function, $B_0 = (\beta_{1,0}, \ldots, \beta_{d,0})$ is a $D \times d$ orthogonal matrix ($B_0^{\mathsf{T}} B_0 = \mathrm{I}_{d \times d}$) with $d < D$ and $\mathsf{E}(\varepsilon \mid X) = 0$ almost surely. The last condition allows ε to be dependent on X. When model (1) holds the projection of the D-dimensional covariate X onto d-dimensional subspace $B_0^{\mathsf{T}} X$ captures all the information that is provided by X on y.

The d-dimensional subspace $B_0^{\mathsf{T}} X$ is called the effective dimension reduction (EDR) space. In fact the space spanned by the column vectors of B_0 is uniquely defined under some mild conditions [4] and is our focus of interest. For convenience we shall refer to these column vectors $(\beta_{1,0}, \ldots, \beta_{d,0})$ as EDR directions, which are unique up to orthogonal transformations. The estimation of the EDR space includes the estimation of the directions, namely B_0, and the corresponding dimension of the EDR space. Since the output y depends on D-dimensional input X through the projection onto d-dimensional subspace $B_0^{\mathsf{T}} X$ with $d < D$ then the effect of "curse of dimensionality" can be significantly weaken and $f(\cdot)$ can be estimated more efficiently. Methods for estimation of EDR directions are very efficient in situation where we should extract some smaller number of features (being some combinations of initial inputs) which can be used to describe the initial dependency efficiently. In particular, in surrogate modeling such preparatory data processing is unavoidable since usually input vectors has very high dimension [2]. For example in order to analyze and optimize a wing of a passenger aircraft it is necessary to construct such surrogate model inputs of which consist of 3D geometrical description of the wing's surface and characteristics of incident flow. Outputs of such surrogate model consist of various aerodynamical characteristics such as wing drag coefficient, lifting coefficient etc. The dependencies between these inputs and outputs are highly nonlinear. Description of wing geometry in the most "parsimonious" engineering models consists about 500 numbers. The size of the data set used for construction of the surrogate model at best is several thousands. Standard methods of function approximation do not work efficiently in case of such big input dimension and limited sample size. At the same time these 500-dimensional input vectors lie in the space of significantly smaller dimension equal to

several dozens. Thus preliminary dimension reduction of inputs should be done for construction of efficient surrogate model. Next, we give a brief review of methods for estimation of EDR directions.

One of the important approaches for estimation of EDR directions are the projection pursuit regression and additive models [3]. The primary focus of projection pursuit regression and additive model is more on the approximation of $f(x)$ by a sum of ridge functions $f_k(\cdot)$, namely $f(X) \approx \sum_{k=1}^{d} f_k\left(\beta_k^{\mathsf{T}} X\right)$, than on looking for the EDR space.

The sliced inverse regression (SIR) method [4] imposes some strong probabilistic structure on X. Specifically, the method requires that, for any constant vector $b^{\mathsf{T}} = (b_1, \ldots, b_D)$, there are constants c_0 and $c^{\mathsf{T}} = (c_1, \ldots, c_d)$ depending on b such that, for the directions B_0 in model (1) $\mathsf{E}\left(b^{\mathsf{T}} X \mid B_0^{\mathsf{T}} X\right) = c_0 + c^{\mathsf{T}} B_0^T X$. As pointed out in [4], the most important family of distributions satisfying this condition is that of elliptically symmetric distributions. However it is of limited use when dealing with time-series data [6].

Finally in [6] (conditional) minimum average variance estimation (MAVE) method for estimation of EDR directions is proposed. This method can be summarized as follows. Consider the regression model (1). The direction B_0 is the solution of

$$\min_{B:\, B^{\mathsf{T}}B=\mathrm{I}} F(B) = \min_{B:\, B^{\mathsf{T}}B=\mathrm{I}} \mathsf{E}\big(y - \mathsf{E}\left(y \mid B^{\mathsf{T}} X\right)\big)^2.$$

For any orthogonal matrix $B = (\beta_1, \ldots, \beta_d)$, the conditional variance given $B^{\mathsf{T}} X$ is

$$\sigma_B^2\left(B^{\mathsf{T}} X\right) = \mathsf{E}\Big(\big(y - \mathsf{E}\left(y \mid B^{\mathsf{T}} X\right)\big)^2 \mid B^{\mathsf{T}} X\Big).$$

It follows that $F(B) = \mathsf{E}\left\{\sigma_B^2\left(B^{\mathsf{T}} X\right)\right\}$.

Suppose that $S = \{(X_i, y_i),\ i = 1, \ldots, n\}$ is a learning sample from (X, y). Linearizing $\mathsf{E}(y_i \mid B^{\mathsf{T}} X_i) \approx a + b^{\mathsf{T}} B^{\mathsf{T}}\left(X_i - X_0\right)$ as a function of $B^{\mathsf{T}} X$ at X_0 we get the estimate of $\sigma_B^2\left(B^{\mathsf{T}} X_0\right)$ as

$$\widehat{\sigma}_B^2\big(B^{\mathsf{T}} X\big) = \min_{a,b} \sum_{i=1}^{n} \omega_{i,0} \Big(y_i - \big(a + b^{\mathsf{T}} B^{\mathsf{T}}(X_i - X_0)\big)\Big)^2,$$

where the weights $\omega_{i,0} = \dfrac{K_h\big(B^{\mathsf{T}}(X_i - X_0)\big)}{\sum_{l=1}^{n} K_h\big(B^{\mathsf{T}}(X_l - X_0)\big)}$, $K_h(\cdot) = h^d K(\cdot/h)$, d is the dimension of $K(\cdot)$ and $K(\cdot)$ denotes values of kernel function at different places.

Thus the estimation of EDR directions can be obtained by solving the minimization problem

$$\min_{B:\, B^{\mathsf{T}}B=\mathrm{I}} \sum_{j=1}^{n} \widehat{\sigma}_B^2\left(B^{\mathsf{T}} X_j\right), \tag{2}$$

$$\widehat{\sigma}_B^2\big(B^{\mathsf{T}} X_j\big) = \min_{\substack{(a_j, b_j) \\ j=1,\ldots,n}} \sum_{i=1}^{n} \omega_{i,j} \Big(y_i - \big(a_j + b_j^{\mathsf{T}} B^{\mathsf{T}}(X_i - X_j)\big)\Big)^2,$$

where $b_j^{\mathsf{T}} = \big(b_{j,1}, \ldots, b_{j,d}\big)$.

Method MAVE is fully nonparametric and requires mild assumptions about properties of the model (1) in order to provide consistent estimate of EDR directions, it significantly outperforms other existing methods for EDR directions estimation and has strict theoretical justification (it was proven that when the sample size grows the estimate of EDR directions converges to the true EDR directions). However method MAVE is computationally very intensive since the number of terms in (2) is equal to n^2, i.e. method MAVE can not work in case of samples with big sizes.

The aim of the work is to modify method MAVE in order to extend it to deal with the case of samples with big sizes and to decrease run time of the algorithm.

Description of an algorithm for EDR directions estimation

Optimization problem (2) can be considered from another point of view. In fact (2) means that in each sample input point X_j, $i = 1, \ldots, n$ tangent hyperplane to the $(D+1)$-dimensional manifold $\big\{(y = f(X), X),\ X \in \mathbb{R}^D\big\}$ is constructed and such matrix B is sought that constructed tangent hyperplanes provide the best approximation to the manifold in the space with reduced dimension.

Such local-linear approximation can be replaced by piecewise-linear approximation consisting of $m \ll n$ number of pieces thereby reducing the number of terms in (2) up to mn. The algorithm can be described as follows.

Input data for the algorithm of EDR estimation:

— learning sample $S = \{(X_i, y_i), i = 1, 2, \ldots, n\}$;
— reduced dimension d;
— threshold value $\varepsilon \ll 1$ used in a stopping criterion.

Output data for algorithm of EDR estimation consists in the estimations $B = (\beta_1, \ldots, \beta_d)$ of EDR directions $B_0 = (\beta_{1,0}, \ldots, \beta_{d,0})$.

Initialization of the algorithm consists in obtaining piecewise-linear approximation of the unknown function $f(X)$ using data sample.

It is proposed to use MARS [3] for construction of piecewise-linear approximation. Let us consider a dictionary $\mathcal{C} = \{(x_j - t)^+, (t - x_j)\}_{\substack{t \in \{x_{1,j}, \ldots, x_{n,j}\}, \\ j=1,\ldots,D}}$ with $2nD$ functions for construction of an approximation, where $(x)^+ = \max(x, 0)$, $X_i = (x_{i,1}, \ldots, x_{i,D})$, $i = 1, \ldots, n$. MARS approximates the function $f(X)$ by $\hat{f}(X) = \alpha_0 + \sum_{k=1}^{M} \alpha_k h_k(X)$, where each $h_k(X)$ is a function in $\mathcal{C}$, or a product of two or more such functions. Such form of the approximator allows getting the decomposition of input space $\mathbb{R}^D = \bigcup_{j=1}^{m} C_j$, where in each C_j the function $f(X)$ is approximated by some linear hyperplane determined by appropriate parameters $\big\{(a_j \in \mathbb{R}^1, b_j \in \mathbb{R}^D),\ j = 1, \ldots, m\big\}$. In accordance with the obtained decomposition the set of indexes $I = \{1, \ldots, n\}$ can also be decomposed

as $I = \bigcup_{j=1}^{m} I_j$, where $I_j = \{i \in \{1,\dots,n\} \colon X_i \in \mathcal{C}_j\}$, $j = 1,\dots,m$.

Let us calculate the weights $\omega_{i,j}$, $i \in I_j$, $j = 1,\dots,m$ by the formula

$$\omega_{i,j} = \frac{(y_i - a_j - b_j^{\intercal} X_i)^{-2}}{\sum_{k \in I_j} (y_k - a_j - b_j^{\intercal} X_k)^{-2}}. \qquad (3)$$

Thereby the results of initialization consist of decompositions $\mathbb{R}^D = \bigcup_{k=1}^{m} C_k$, $I = \bigcup_{j=1}^{m} I_j$, parameters $(a_j, b_j)_{j=1}^{m}$, and weights $\omega_{i,j}$, $i \in I_j$, $j = 1,\dots,m$.

Stopping criterion. Let us denote by $E(B_1, B_2) = \operatorname{tr}\big(B_2^{\intercal}(\mathrm{I} - B_1 B_1^{\intercal}) B_2^{\intercal}\big)$ the distance between two matrices B_1 and B_2 of the same size used in [6]. The algorithms is stopped if $E(B^{k-1}, B^k) < \varepsilon$ where B^{k-1} and B^k are estimations of EDR directions obtained on $(k-1)$ and k iterations of the algorithm.

During the k-th iteration of algorithm the following steps are done:

Step 1. Find $B^k = \underset{B \colon B^{\intercal} B = \mathrm{I}}{\arg\min}$
$$\left(\sum_{j=1}^{m} \sum_{i \in I_j^{k-1}} \omega_{i,j}^{k-1} \Big(y_i - \big(a_j^{k-1} + (b_j^{k-1})^{\intercal} B^{\intercal} X_i \big) \Big)^2 \right).$$

Step 2. For fixed $B = B^k$ find $\big(a_j^k, b_j^k\big)_{j=1}^{m} = \underset{(a_j, b_j)_{j=1}^{m}}{\arg\min}$
$$\left(\sum_{j=1}^{m} \sum_{i \in I_j^{k-1}} \omega_{i,j}^{k-1} \Big(y_i - \big(a_j + b_j^{\intercal} B^{\intercal} X_i \big) \Big)^2 \right).$$

Step 3. Update the decomposition $I = \bigcup_{j=1}^{m} I_j$ by reassigning every point (X_i, y_i), $i = 1,\dots,n$ to such cluster C_j, $j = 1,\dots,m$ for which the absolute error $\big| y_i - a_j - b_j^{\intercal} (B^k)^{\intercal} X_i \big|$ is the smallest.

Step 4. Calculate the weights $\omega_{i,j}^k$, $j = 1,\dots,m$, $i \in I_j$ using formula (3), the obtained decomposition $I^k = \bigcup_{j=1}^{m} I_j^k$ and coefficients $\big(a_j^k, b_j^k\big)_{j=1}^{m}$.

After the k-th iteration of the algorithm the stopping criterion is checked. If it is not fulfilled the number of iteration is increased, i. e. $k \leftarrow k+1$ and the next iteration is done.

Embedding of dimension reduction procedure into function approximation algorithm

In order to model the function $f(z)$ usually such function class F_p is used functions $\hat{f}_p(z) \in F_p$ (approximators) from which can be represented as expansions in some parametric functions $\psi_j(z)$, $j = 1,\dots,p$, i.e. $\hat{f}_p(z) = \sum_{j=1}^{p} \alpha_j \psi_j(z) + \alpha_0$. Two main classes of parametric functions are used, namely sigmoid and radial basis functions [3]. The complexity of such function class F_p is specified by the number of adjustable parameters $m(d,p) = p(d+2)+1$ depending on the value of $p \geqslant 0$.

When applying methods for EDR space estimation and subsequent recovery of the function $f(z)$ simultaneous estimation of two parameters defining the complexity of used models (1) and $\hat{f}_p(z)$ should be done accurately in order to avoid overtraining: dimension d of the subspace $B_0^{\intercal} X$ and complexity p of the approximator $\hat{f}_p(z)$. Method for estimation of d proposed in [6] is not well suited in the considered situation. The fact is that the method is designed for usage with multivariate nonparametric regression but not with approximator $\hat{f}_p(z)$ based on an expansion in parametric functions from the dictionary.

In order estimate parameters d and p an approach based on cross-validation is proposed:

1. Small test set is extracted from the learning set.
2. On each step of algorithm for some fixed value of d EDR directions are estimated and then an approximator $\hat{f}_p(z)$ is constructed (for example using algorithm from [1]). The value of p is estimated using algorithm from [5]. The error of approximation is calculated using test set. After that the value of d is incremented and the same calculations is performed.
3. If the error of approximation increases for predefined number of successive values of d then the process is stopped. Otherwise the process is stopped when $d = D$.
4. If the iterative process has been stopped for $d < D$ then for $d = D$ the Step 2 is performed. Such values of d and p is chosen that the error of approximation is the smallest.

Computational experiments

In the present section the results of computational experiments are presented for comparison of MAVE and proposed algorithm denoted as Fast MAVE (FMAVE). For data generation three artificial functions are used:

1. $f(X) = x_1(x_1 + x_2 + 1)$, where $X = (x_1,\dots,x_{10})$.
2. $f(X) = X^{\intercal}\beta_1 (X^{\intercal}\beta_2)^2 + X^{\intercal}\beta_3 (X^{\intercal}\beta_4)$, where $X = (x_1,\dots,x_{10})$, $\beta_1 = (1,2,3,4,0,0,0,0,0,0)/\sqrt{30}$, $\beta_2 = (-2,1,-4,3,1,2,0,0,0,0)/\sqrt{35}$, $\beta_3 = (0,0,0,0,2,-1,2,1,2,1)/\sqrt{15}$, $\beta_4 = (-2,1,-4,3,1,2,0,0,0,0)/2$.
3. $f(X) = 4\sqrt{\beta_1^{\intercal} X}\sin^2(\beta_1^{\intercal} X)$, where $X = (x_1,\dots,x_{10})$, $\beta_1 = (1,2,0,0,0,0,0,0,0,0)/\sqrt{5}$.

For each function learning sample of size $n = 400$ was generated for uniformly randomly distributed $X \in [0,1]^{10}$. In the second and third columns of the table 1 there are values of $E(B_0, B)$, where B is an estimate of real EDR directions B_0. In the second and third columns of the table 2 there are values of cross-validation error CV for nonparametric regression used for approximation of unknown function $f(\cdot)$ after estimating the EDR directions. It can be seen that the values of $E(B_0, B)$ and CV for MAVE does not significantly differ from those for FMAVE. In the fourth

column of the table 2 there are ratios of run times ($TR = t_{\mathrm{MAVE}}/t_{\mathrm{FMAVE}}$). It can be seen that the proposed algorithm FMAVE is significantly faster providing comparable values of CV. When performing computational experiments we supposed that the values of d were known. Approaches for estimation of d can be found in [6] and in previous section.

Now we compare approximator constructed on basis of initial learning data sample and approximator based on inputs projected onto EDR space. For estimation of EDR space MAVE and FMAVE are used. In tables 4 and 5 obtained results for artificial functions can be found. In the second column of the table 4 mean absolute error (MAE) of approximation algorithm HDA from [1] is depicted. In the second and third columns of the table 5 MAE for HDA with preliminary dimension reduction using MAVE and FMAVE algorithms are depicted. It can be seen that application of preliminary dimension reduction can significantly reduce the error of approximation.

In the tables 3 and 6 analogous results can be found for real data (from FP7 project "CRESCENDO") describing turbine blades. There are no values for $E(B_0, B)$ since for real data B_0 is not known.

Conclusions

At present moment method MAVE is the most powerful method for estimation of EDR directions. However it is not computationally efficient and can not deal with the case of samples with big sizes. In the present work the modification of method MAVE is described which extends method MAVE to deal with the case of samples with big sizes. This modification is obtained by using piecewise-linear approximation of unknown dependency in localized clusters instead of using local-linear approximation constructed at each point from the learning sample. For obtaining such localized clusters special iterative optimization algorithm is proposed. An algorithm for embedding of proposed dimension reduction procedure into function approximation algorithm is proposed. Experiments with artificial and real data showed better performance of developed procedures compared to conventional ones.

Table 1. Values of $E(B_0, B)$ (artificial functions).

Data	$E_{\mathrm{MAVE}}(B_0, B)$	$E_{\mathrm{FMAVE}}(B_0, B)$
$f_1(X)$	0.0091	0.0125
$f_2(X)$	0.0978	0.1221
$f_3(X)$	0.0026	0.0039

Table 2. Values of CV and TR (artificial functions).

Data	CV_{MAVE}	CV_{FMAVE}	TR
$f_1(X)$	0.1178	0.1195	3.1
$f_2(X)$	0.2158	0.2830	13.37
$f_3(X)$	0.3612	0.4752	2.52

Table 3. Values of CV (real data).

CV_{MAVE}	CV_{FMAVE}	TR
0.1767	0.2422	2.1

Table 4. MAE for approximation without preliminary dimension reduction (artificial functions).

Data set	MAE_{HDA}
$f_1(X)$	0.0502
$f_2(X)$	0.1380
$f_3(X)$	1.0344

Table 5. MAE for approximation with preliminary dimension reduction (artificial functions).

Data set	$MAE_{\mathrm{HDA+MAVE}}$	$MAE_{\mathrm{HDA+FMAVE}}$
$f_1(X)$	0.0073	0.0201
$f_2(X)$	0.0488	0.0820
$f_3(X)$	0.2774	0.2697

Table 6. Values of MAE for the case of real data.

MAE_{HDA}	0.4152
$MAE_{\mathrm{HDA+MAVE}}$	0.2646
$MAE_{\mathrm{HDA+FMAVE}}$	0.3106

References

[1] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V.* About hybrid algorithm for tuning of parameters in approximation based on linear expansions in parametric functions // 8th Intl. Conf. Intelligent Information Processing. — 2010. — Pp. 200–203 (in this book).

[2] *Kuleshov A. P., Bernstein A. V.* Predictive metamodelling and data analysis // 8th Intl. Conf. Intelligent Information Processing. — 2010. — Pp. 212–215 (in this book).

[3] *Hastie T., Tibshirani R., Friedman J.* The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction. — Springer, 2008. — 763 p.

[4] *Li K. C.* Sliced inverse regression for dimension reduction (with discussion) // J. Am. Statist. Ass. — 1991. — Vol. 86. — Pp. 316–342.

[5] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Lokot A. S.*. Model selection in function approximation problem based on statistical learning theory // Proceedings of 9th International Conference Computer Data Analysis and Modeling, Minsk, Belarus, 2010.

[6] *Yingcun Xia, Howell Tong, Li W. K., Li-Xing Zhu.* An adaptive estimation of dimension reduction space // J. R. Statist. Soc. B. — 2002. — Vol. 64, No. 3. — Pp. 363–410.

Metamodelling with using domain-specific knowledge

Kuleshov A. P., Bernstein A. V., Burnaev E. V.
kuleshov@iitp.ru, a.bernstein@cpt-ran.ru, burnaev@iitp.ru
IITP, ISA, IITP, Moscow, Russia

Methods for construction of metamodels are mainly based on the solution of data based recovery of unknown function. Taking into account the subject domain knowledge can significantly increase quality of constructed metamodel. In the present work some particular class of subject domain knowledge is formalized and the method for its integration into the process of metamodels construction is proposed. In particular, it is proposed two new approaches for construction of approximation taking into account some specific invariance of the considered problem. The first approach for approximation allows taking into account invariance of the approximation problem with respect to some finite group of transformations. The second one allows taking into account that the output of approximating function has additive structure with respect to predefined blocks of input vector components. Application of the proposed approaches to real problems allows significantly decreasing an error in approximation problems with symmetry/invariance.

Метамоделирование с учетом знаний из предметной области

Кулешов А. П., Бернштейн А. В., Бурнаев Е. В.
Москва, ИППИ РАН, ИСА РАН, ИППИ РАН

Для построения метамоделей в основном применяют методы решения задачи восстановления неизвестной зависимости по данным. Использование знаний из предметной области, породившей данные, позволяет строить более точные метамодели. В данной работе формализован некоторый конкретный тип знаний из предметной области и предложен метод для интеграции этих знаний в процесс построения метамодели. В частности, предложено два новых подхода для построения аппроксимации с учетом определенных свойств инвариантности рассматриваемой задачи. Первый подход позволяет учесть инвариантность задачи аппроксимации относительно некоторой конечной группы преобразований. Второй подход позволяет учесть аддитивную структуру восстанавливаемой зависимости относительно заранее определенных групп компонент входного вектора. Применение предложенных подходов к реальным задачам позволяет существенно сократить ошибку восстановления зависимостей, имеющих симметрию/инвариантность.

Introduction

Problem of function approximation based on data as an element of based on the data metamodel construction problem was formulated in [1]. Let M be some initial model (method) which allows for the given input $X \in \mathbf{X} \subset \mathbb{R}^p$ constructing the value $Y = F_M(X) \in \mathbb{R}^q$ of response function. Let

$$D_N = \big\{\big(X_i, Y_i = F_M(X_i)\big),\ i = 1, \ldots, N\big\}$$

be results of N experiments with the model M for the input data set $\mathbf{X}_N = \{X_i,\ i = 1, \ldots, N\}$. Based on this data set an approximation function (approximator) $Y = F_{\mathrm{SM}}(X) = F_{\mathrm{SM}}(X \,|\, D_N)$ for the initial dependence $Y = F_M(X)$ is constructed. If for all $X \in \mathbf{X}$ (not only for $X \in \mathbf{X}_N$) an approximate equality $F_{\mathrm{SM}}(X) \approx F_M(X)$ takes place then the new model SM defined by the constructed dependency $F_{\mathrm{SM}}(X)$ can be considered as a surrogate for the initial model M and is named as the surrogate model (model over model, metamodel).

Quality of the constructed approximation can be estimated by the mean squared error of approximation

$$\varepsilon\left(F_{\mathrm{SM}} \,|\, D_N\right) = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\big\|Y_i - F_{\mathrm{SM}}(X_i)\big\|^2}$$

on the learning set D_N, but at the same time constructed dependency should have "generalization ability", i. e. provide sufficient accuracy for other points $X \in \mathbf{X} \setminus \mathbf{X}_N$.

In many applications some additional a priori information about the unknown function $F_M(X)$ can also be known.

Knowledge and models of subject domain in many cases can be described by choosing some subset $\mathbf{X}_{\mathrm{knowledge}} \subset \mathbf{X}$ in the input feature space, such that problem of model $F_M(X)$ construction for $X \in \mathbf{X}$ can be reduced to the problem of model $F_M(X)$ construction only for $X \in \mathbf{X}_{\mathrm{knowledge}}$. Usually subset $\mathbf{X}_{\mathrm{knowledge}}$ has significantly smaller intrinsic dimension or other specific properties, usage of which allow significant increase of efficiency of metamodel.

Example 1. The initial model $M = M_{\mathrm{stress}}$ used for calculating with the help of finite element method of reserve factors Y of an aircraft stringer as a function $F_M(X)$ of geometrical shape of the stringer, material properties and forces, applied to the stringer was considered in [6].

Among the components of the p-dimensional input vector $X = (x_1, \ldots, x_p)$ there are components describing the width and length of the rectangular surface of the stringer (let say these are components x_1

and x_2 of the vector X). Then the function $F_M(X)$ has the symmetry property:

$$F_M(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_p) \equiv F_M(x_2, x_1, x_3, \ldots, x_p). \quad (1)$$

Example 2. Let $I_1, \ldots, I_m$, $m > 1$, be some emission sources and j-th emission source is characterized by the p-dimensional parameter x_j, $j = 1, \ldots, m$. Let $y_j = f(x_j)$, $j = 1, \ldots, m$, be the field created by the j-th source in the given measurement point. Measured total field $Y = F(X)$ depends on the $(p \times m)$-dimensional vector $X = (x_1, \ldots, x_m)$. If the total field Y is equal to the sum of the fields generated by each of the emission source then the function $F(X)$ has the form

$$F(X) = F(x_1, x_2, \ldots, x_m) = \\ = f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_m). \quad (2)$$

In general a priori information from the Example 1 about the approximated function $F(X)$ can be formulated as follows. Let $G = \{g\}$ be the known group consisting of finite number $|G|$ of transformations of the set of $\mathbf{X} \subset \mathbb{R}^p$ into itself. Let the function $F_M(X)$ be invariant with respect to the group G:

$$F(X) \equiv F(gX), \quad X \in \mathbf{X},\ g \in G. \quad (3)$$

In Example 1 the group G of transformations of $\mathbb{R}^p$ into itself consists of two elements $\{g, e\}$, where $gX = (x_2, x_1, x_3, \ldots, x_p) \in \mathbb{R}^p$, and $e = g^2$ is identical transformation. It is obvious that the group G is isomorphic to the group S_2 of permutation of two elements.

Let us call the initial model for which (2) or (3) is satisfied as the invariant (with respect to the group of transformations G) model and respectively the model with additive structure.

Other examples of formalization and usage of knowledge from subject domain can be found in [5].

Approximation of an invariant model

Let us consider the problem of constructing the surrogate model for the initial model $Y = F(X)$ having the invariant property (3) with respect to the group of transformations G.

It is obvious that the extended sample

$$D_{N,G} = \{D_N(g),\ g \in G\}, \quad (4)$$

consisting of $N \times |G|$ elements

$$D_N(g) = \big\{\big(X_i, Y_i = F(gX_i)\big),\ i = 1, \ldots, N\big\}$$

can be used for constructing the approximator $F_S(X \,|\, D_{N,G})$ with the mean error

$$\varepsilon\,(F_S \,|\, D_{N,G}) = \sqrt{\frac{1}{N|G|}\sum_{i=1}^{N}\sum_{g\in G}\big\|Y_i - F_S(gX_i)\big\|^2}, \quad (5)$$

calculated for the extended sample $D_{N,G}$ (4). It can be proved that

$$\varepsilon^2\,(F_S \,|\, D_{N,G}) = \varepsilon^2\,(F_{SG} \,|\, D_N) + \Delta^2(E_S, G, D_N), \quad (6)$$

here

$$F_{SG}(X) = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G} F_S(gX) \quad (7)$$

is a "symmetrized" approximator and

$$\Delta^2(E_S, G, D_N) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} V_G(X_i), \quad (8)$$

where

$$V_G(X) = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\big(F_S(gX) - F_{SG}(X)\big)^2 = \\ = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\big(F_S(gX)\big)^2 - \big(F_{SG}(X)\big)^2. \quad (9)$$

Quantities $F_{SG}(X)$ in (7) and $V_G(X)$ in (9) can be considered as a mathematical expectation $\mathsf{E}_G\big(F_S(gX)\big)$ and a variance $\mathsf{D}_G\big(F_S(gX)\big)$ of the random variable $F_S(gX)$ in which the random element g is selected in the group G uniformly randomly.

Thus the error $\varepsilon\,(F_S \,|\, D_{N,G})$ (5) also can be represented as a mathematical expectation of the random error $\varepsilon\big(F_S \,|\, D_N(g)\big)$:

$$\varepsilon\,(F_S \,|\, D_{N,G}) = \mathsf{E}_G\big(\varepsilon\big(F_S \,|\, D_N(g)\big)\big). \quad (10)$$

It follows from the equation (6) that the initial approximator $F_S(X)$ is strictly majorized by its invariant version $F_{SG}(X)$ (7) unless only the approximator $F_S(X)$ is invariant with respect to the group G (at least on the set $\mathbf{X}_N$) when the approximators $F_S(X)$ and $F_{SG}(X)$ coincide.

Many widely used in practice procedures for construction of nonlinear approximators (Multidimensional Non-Parametric Regression, Kernel Ridge Regression, Support Vector Regression, Artificial Neural Networks, Radial Basis Function Networks etc.) construct the approximating dependencies in the form of linear combinations $\sum_{j=1}^{p}\alpha_j \times h(X, \beta_j)$ of nonlinear functions $h(X, \beta)$ from the chosen "dictionary" [6]. For such approximators the invariant approximator also has the form of linear combination $\sum_{j=1}^{p}\alpha_j \times H_G(X, \beta_j)$ of functions from the dictionary, consisting of the symmetrized functions

$$H_G(X, \beta) = \mathrm{E}_G\big(h(gX, \beta)\big).$$

Approximation of a model with additive structure

Let the vector $X = (x_1 : x_2 : \ldots : x_m) \in \mathbb{R}^{pm}$ be represented as m sequentially written subvectors $\{x_1, \ldots, x_m\}$ with the same dimension p. From

the additive property (2) it follows that for the vector $x \in \mathbb{R}^p$

$$f(x) = \frac{1}{m} F(x : x : \ldots : x), \tag{11}$$

for any vector $x \in \mathbb{R}^p$ and consequently

$$F(X) = F(x_1 : x_2 : \ldots : x_m) = \tag{12}$$
$$= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} F(x_i : x_i : \ldots : x_i).$$

It is obvious that the models with additive structure are invariant with respect to the group of transformations G_m of $\mathbb{R}^{pm}$ into itself which is isomorphic to the permutation group S_m with the order m: if $g = (i_1, \ldots, i_m)$ is some permutation of the numbers $(1, \ldots, m)$ then $gX = (x_{i_1} : x_{i_2} : \ldots : x_{i_m})$.

Let $F_S(X)$ be some initial approximator and

$$F_{SL}(X) = F_{SL}(x_1 : x_2 : \ldots : x_m) = \tag{13}$$
$$= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} F_S(x_i : x_i : \ldots : x_i)$$

be its "additivited" version. It is obvious that the approximator $F_{SL}(X)$ is invariant with respect to the group G_m.

If the approximator $F_S(X)$ has the form

$$\sum_{j=1}^{p} \alpha_j \times h(X, \beta_j) \equiv \sum_{j=1}^{p} \alpha_j \times h\big((x_1 : x_2 : \ldots : x_m),\ \beta_j\big),$$

then the approximator $F_{SL}(X)$ (13) has the form

$$\sum_{j=1}^{p} \alpha_j \times H_L\left(X, \beta_j\right),$$

where

$$H_L\left(X, \beta\right) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} h\big((x_i : x_i : \ldots : x_i),\ \beta\big).$$

Results of computational experiments

In order to analyze efficiency of proposed procedures the computational experiments were performed.

Let us consider first results of computational experiments with artificial functions invariant with respect to the group S_2 of permutation of two elements. We use two test functions

$$f_1(x) = \log\big(|x_1 x_2| + 1\big) + \log\left(1 + x_1^2 + x_2^2\right),$$

$(x_1, x_2) \in [0, 1]^2$, and

$$f_2(x) = \sin\big(\pi(x_1^2 + x_2^2)\big),$$

$(x_1, x_2) \in [0, 1]^2$. Learning sample $D_{\text{learn},k}$ was obtained consisting of $N_{\text{learn}} = 400$ uniformly randomly generated inputs $(x_1, x_2) \in [0, 1]^2$ and corresponding outputs for function $f_k(x)$, $k = 1, 2$. Using these samples both the approximator $F_{S,k}(X)$ proposed in [2] and its invariant version $F_{SG,k}(X)$ were constructed, $k = 1, 2$. Mean errors $\varepsilon\left(F_{S,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$ and $\varepsilon\left(F_{SG,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$ of these approximators $F_{S,k}(X)$ and $F_{SG,k}(X)$ were calculated for new testing sample $D_{\text{test},k}$, $k = 1, 2$ consisting of $N_{\text{test}} = 1000$ results of other independent experiments. The values of these errors are listed in the Table 1.

Table 1. Errors $\varepsilon\left(F_{S,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$ and $\varepsilon\left(F_{SG,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$ of approximators $F_{S,k}(X)$ and $F_{SG,k}(X)$ for function $f_k(x)$, $k = 1, 2$.

k	$\varepsilon\left(F_{S,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$	$\varepsilon\left(F_{SG,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$
1	6.5494E-04	9.4842E-05
2	1.4385E-02	5.2925E-03

Table 2. Errors $\varepsilon\left(F_S \,|\, D_{\text{test}}\right)$ and $\varepsilon\left(F_{SG} \,|\, D_{\text{test}}\right)$ of approximators $F_S(X)$ and $F_{SG}(X)$.

$\varepsilon\left(F_{S,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$	$\varepsilon\left(F_{SG,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$
4.4117E-03	3.5750E-03

In Example 1 learning sample D_{learn} consisting of $N_{\text{learn}} = 50\,000$ results of experiments with model M_{stress} was obtained. Using this sample both the approximator $F_S(X)$ proposed in [2] and its invariant version $F_{SG}(X)$ were constructed. Mean errors $\varepsilon\left(F_S \,|\, D_{\text{test}}\right)$ and $\varepsilon\left(F_{SG} \,|\, D_{\text{test}}\right)$ of these approximators $F_S(X)$ and $F_{SG}(X)$ were calculated for new testing sample D_{test} consisting of $N_{\text{test}} = 100\,000$ results of other independent experiments. The values of these errors are listed in the Table 2.

Let us consider for Example 2 several training samples $D_{\text{train},k}$, $k = 1, \ldots, 4$, consisting of the same number $N_{\text{train}} = 10\,000$ of measuring results of total field generated by $m = 2$ emission sources. In the k-th series of measurements the sets $\mathbf{X}_{\text{learn},1}$ and $\mathbf{X}_{\text{learn},2}$ consisting of the $p = 7$ dimensional values of characteristics x_1 and x_2 of the emission sources I_1 and I_2 were chosen randomly in the set $\mathbf{X}_k \subset \mathbb{R}^p$, $k = 1, \ldots, 4$. These sets differ in a spread of the emission sources positions and in their frequency characteristics. Using generated learning sets both the approximator $F_{S,k}(X)$ proposed in [2] and its invariant $F_{SG,k}(X)$ and additive versions $F_{SL,k}(X)$, $k = 1, \ldots, 4$ versions were constructed, $k = 1, \ldots, 4$.

Mean errors $\varepsilon\left(F_{S,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$, $\varepsilon\left(F_{SG,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$ and $\varepsilon\left(F_{SL,k} \,|\, D_{\text{test},k}\right)$ of the approximators $F_{S,k}(X)$, $F_{SG,k}(X)$ and $F_{SL,k}(X)$ were calculated for new testing samples $D_{\text{test},k}$, $k = 1, \ldots, 4$ each consisting of $N_{\text{test}} = 50\,000$ results of other independent experiments in which the characteristics of emission sources were also chosen randomly in the sets $\mathbf{X}_k \subset \mathbb{R}^p$.

Table 3. Errors $\varepsilon\left(F_{S,k} \mid D_{\text{test},k}\right)$ and $\varepsilon\left(F_{SG,k} \mid D_{\text{test},k}\right)$ of approximators $F_{S,k}(X)$ and $F_{SG,k}(X)$, $k = 1, \ldots, 4$.

k	$\varepsilon\left(F_{S,k} \mid D_{\text{test},k}\right)$	$\varepsilon\left(F_{SG,k} \mid D_{\text{test},k}\right)$
1	0.0263	0.0099
2	0.0421	0.0171
3	0.0446	0.0209
4	0.0510	0.0294

Table 4. Error $\varepsilon\left(F_{SL,k} \mid D_{\text{test},k}\right)$ of approximator $F_{SL,k}(X)$, $k = 1, \ldots, 4$.

k	$\varepsilon\left(F_{SL,k} \mid D_{\text{test},k}\right)$
1	0.0037
2	0.0052
3	0.0072
4	0.0098

The normalized (with respect to the output's range) values of the errors are listed in the Tables 3 and 4.

Obtained results clearly demonstrate an efficiency of use of data-domain knowledge in surrogate models.

References

[1] *Bernstein A. V., Kuleshov A. P.* Predictive metamodeling and data analysis // In the present book, 2010.

[2] *Bernstein A. V., Burnaev E. V., Kuleshov A. P.* On a methodology for constructing approximations of multidimensional dependences // Plenary and Selected Papers of the Fourth International Conference "Parallel Computations and Control Problems", Moscow: V. A. Trapeznikov Institute of Control Systems of RAS, 2008. — Pp. 56–62.

[3] *Burnaev E. V., Grihon S.* Construction of the Metamodeles in Support of Stiffened Panel Optimization // Extended abstracts of VI International Conference "Mathematical Methods in Reliability. Theory. Methods. Applications" (MMR-2009), Moscow, 2009. — Pp. 124–128.

[4] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V.* About hybrid algorithm for tuning of parameters in approximation based on linear expansions in parametric functions // In the present book, 2010.

[5] *Chernova S. S., Ivanova E. P.* Reduction of complex geometrical object dimension in the presence of particular parametric models // Artificial Intelligence and Decision Making. — 2009. — Vol. 3. — Pp. 53–58.

[6] *Kuleshov A. P., Bernstein A. V.* Cognitive technologies in adaptive models of complex plants. // Keynote papers of 13th IFAC Symposium on Information Control Problems in Manufacturing (INCOM'09), Moscow, 2009. — Pp. 70–81.

Predictive metamodeling and data analysis

Kuleshov A. P., Bernstein A. V.
kuleshov@iitp.ru, a.bernstein@irias.ru
IITP, ISA, Moscow, Russia

The paper addresses various aspects of the construction and application of metamodels in CAD systems, outlines basic data analysis and simulation tasks essential for metamodel construction, reviews the current state of the art and proposes innovative approaches based on cognitive data analysis and simulation technologies.

Предсказательное моделирование и анализ данных

Кулешов А. П., Бернштейн А. В.
Москва, ИППИ РАН, ИСА РАН

В работе рассматриваются различные аспекты построения и применения метамоделей в CAD-системах, описаны основные задачи анализа данных и моделирования, решение которых необходимо при построении метамоделей, проведен обзор современного положения дел в метамоделировании и предложены новые подходы к метамоделированию на основе технологий когнитивного анализа данных и моделирования.

Introduction

The design process involves the comparison of various engineering solutions with regard to the object's structure, operating mechanisms and other elements. Knowledge-based and computer aided engineering systems used for decision support are substantially the prediction modelling systems. An object design process usually deals with two basic tasks:

— analyzing a specific object configuration, i. e. calculating various performances (Y) of the object based on the input data (X) that in a general case come in the form of the object's digital description and parameters of the object proper and its environment,
— optimizing the object structure by creating a digital object description with the targeted best performances for the specified operating conditions subject to various constraints.

Significant advance in mathematical modelling and enhanced capabilities of up-to-date computers allow developers to investigate a large number of design alternatives with different configurations and parameters, predict the expected performances and find the best solutions without conducting full-scale experiments. Therefore, mathematical modelling, which involves series of computational experiments for the investigation of analytical models of an object and its environment, has become one of the most common methods of analysis and optimization of an engineering object's structure.

Traditionally, modelling is performed with the aid of mathematical models which are based on "process physics" and describe physical processes and phenomena occurring in the course of an object's operation by complex partial differential equations with boundary conditions, for which in most cases nothing is known either about the theorems of existence or uniqueness of the solution or the dependence of the solution from the parameters or boundary conditions. These equations are solved using complicated numerical methods that require significant computing resources and a lot of effort for preparing input data and computational meshes. Thus models based on process physics have a limited scope of application, especially at the conceptual design phase when large numbers of various design alternatives have to be considered and making the wrong choice can have far-reaching consequences.

Recent years have witnessed rapid development of metamodelling — a new field in mathematical modelling dealing with data-based models [15, 19, 21] created with the aid of machine learning technique [20] by training on a set of input and output data prototypes obtained as a result of full-scale and/or computational experiments with different objects from the class.

The models constructed in this manner actually simulate or replace both the data sources based on some initial model and the models created as a result of process physics investigation, so such adaptive models are sometimes referred to also as metamodels, models over models, or surrogate models.

As a rule, surrogate models display a much higher computational efficiency as compared to the initial models. For example, the metamodels built from the experimental results obtained using a CFD-model based on the numerical solution of aerodynamics differential equations made the calculations 350 000 times faster, with the relative error not exceeding 1% [1]. Another example is a metamodel replacing the initial aircraft structural strength model based on the numerical solution of the equations by the finite element method. The metamodel increased the calculation speed by thousands of times [9] while ensuring the required accuracy level.

Most of the standard methods widely applied in metamodel construction consist in a reconstruction

Международная конференция «Интеллектуализация обработки информации» (ИОИ-8), Кипр, г. Пафос, 17–24 октября 2010 г.
International conference "Intelligent Information Processing" IIP-8, Cyprus, Paphos, October 17–24, 2010.

of an unknown function based on the data, i. e. in constructing the approximating, or regression, function. The authors' experience shows however that construction of metamodels for many real applications involves a series of interrelated intelligence data analysis tasks in which the outputs of one specific task are used as input data for another task and the objective functions cannot be specified independently for each particular task [5, 6, 17]. Formal problem statements have a number of specific features that distinguish them from classical task definitions. For example, the support of the processed multidimensional data can lie on non-linear data manifolds of much smaller dimension — a fact which is not taken into account in standard mathematical data analysis methods.

Besides, metamodels can be constructed using domain-specific knowledge and models in addition to the data. The cognitive data analysis technology allows formalizing the knowledge and models from a subject domain into knowledge manifolds that comes in as submanifolds in the data manifold [18]. For example, it can follow from an essence of the task that the initial model is invariant with reference to the known group of transformations of input variables, thus making it possible to construct more accurate surrogate models [16].

The paper cites several examples of essential applied tasks in which metamodelling is indeed the only way of dealing with the prediction modelling problem. The following sections describe the main requirements to the metamodels, formulate the key data analysis tasks to be attacked in the metamodel construction, give a detailed review of the interrelated approximation and dimension reduction tasks and propose the appropriate solution techniques and algorithms. Their performances are illustrated by the results of the computational experiments with real and artificial data. The concluding part is dedicated to the computer support for metamodelling.

Approximation in metamodeling

Let M be some initial model or method that allows constructing a response function for the specified input data set $x \in \mathbf{X} \subset \mathbb{R}^p$ by calculating the value of the characteristic $y = F_M(X) \in \mathbb{R}^q$. Assume that $D_N = \big\{\big(x_i, y_i = F_M(x_i)\big),\ i = 1, \ldots, N\big\}$ is the result of N experiments with the model M for an input data set $\mathbf{X}_N = \{x_i,\ i = 1, \ldots, N\}$ which is used to construct the approximation $y = F_{\mathrm{SM}}(x) = F_{\mathrm{SM}}(x \,|\, D_N)$ for the initial dependency $y = F_M(x)$. If the approximate equality $F_{\mathrm{SM}}(x) \approx F_M(x)$ holds for all $x \in \mathbf{X}$ and not only $x \in \mathbf{X}_N$, then the model SM described by the constructed dependency $F_{\mathrm{SM}}(x)$ can be regarded as a surrogate model, or a metamodel, for the initial model M.

The procedures used to find the dependency $F_{\mathrm{SM}}(x \,|\, D_N)$ are normally based on minimizing the mean approximation error

$$\varepsilon_N(F_{\mathrm{SM}}) = \Big(\sum_{i=1}^{N} \big\|y_i - F_{\mathrm{SM}}(x_i)\big\|^2\Big)^{1/2}$$

on the learning data set D_N. Note that the resulting dependency must have a "generalizing capability", i. e. ensure the required accuracy for other points $x \in \mathbf{X} \setminus \mathbf{X}_N$. The function $F_M(x)$ is usually sought for in the parametric class of functions represented by the linear combinations $\sum_j \alpha_j \times h(x, \beta_j)$ of the functions from the selected dictionary, while the minimization of the error $\varepsilon_N(F_{\mathrm{SM}})$ amounts to minimization over the set of parameters $\{(\alpha_j, \beta_j)\}$. If the functions $h(x, \beta_j)$ have the form $h_j(x)$, we shall obtain an ordinary linear regression model. A variety of procedures are available for constructing nonlinear approximation dependencies $F_{\mathrm{SM}}(x)$ for specific dictionaries: multidimensional non-parametric regression, Kernel ridge regression (kriging), Support Vector Regression, Artificial Neural Networks, Radial Basic Functions, etc. New efficient approximation procedures are proposed in [7, 10, 11, 12, 13].

Dimension reduction in metamodeling

High dimensionality of input data is a notable feature of applied tasks. For instance, detailed descriptions of geometric objects, such as curves and surfaces or their components are generally specified by a set of 2D or 3D coordinates of the surface points lying in the selected nodes of the geometric object. Other points are usually reconstructed by splines. Such detailed descriptions of curves and surfaces are used in CAD-systems, computer graphics and other applications. A detailed digital description of an object, such as the 3D aircraft surface in the aerodynamic analysis mentioned in [1], consists of tens of thousands of numbers, each of which is meaningless if considered in isolation. High dimensionality of the digital description makes it very hard or even impossible to approximate a function that depends on high dimension vectors.

For analysis and optimization of a wing of passenger aircraft it is necessary to construct such surrogate model inputs of which consist of 3D geometrical description of the wing's surface and characteristics of incident flow. Outputs of such surrogate model consist of various aerodynamical characteristics such as wing-drag, lifting coefficient etc. The dependencies between these inputs and outputs are highly nonlinear. Description of wing geometry in the most "parsimonious" engineering models consists of more than 500 numbers. The size of the data set used for construction of the surrogate model at best is several thousands. Standard methods of function approximation do not work effectively in case of such big input dimension and limited sample size. At the same time these 500-dimensional input vectors lie in the space

of significantly smaller dimension equal to several dozens. Incorporation of intrinsic dimension reduction procedures into the procedure for surrogate models construction allowed significant increase of accuracy of the constructed surrogate model.

In applications, the input vector $x \in \mathbf{X}$ has meaningful values that make sense for the subject domain provided that it satisfies to various constraints and is characterized by multiple interrelations between its various components. Therefore, the set $\mathbf{X}$ usually lies, at least approximately, in the neighbourhood of some manifold $\mathbf{G}_m \subset \mathbb{R}^p$ which has dimension $m \ll p$ and in a general case is non-linear. This implies that the approximation task must be solved within the neighbourhood of the manifold $\mathbf{G}_m$. There is one more important reason for finding the approximating manifold $\mathbf{G}_m$: the learning data set Σ should be obtained by computational experiments that require generation of the input data set (X, Y), with the digital descriptions of X generated in the neighbourhood of the manifold $\mathbf{G}_m$. Moreover, new values of X generated in the process of optimization should also lie close to $\mathbf{G}_m$.

In the majority of cases, the approximating manifold $\mathbf{G}_m$ is unknown is unknown and must be constructed from the data set $\mathbf{X}_N$ by addressing a classical dimension reduction task that can be formulated as follows: find the procedure $\Sigma = \{m, C_m, R_m\}$ defined by the specified dimension m, the compression procedure $C_m\colon x \in \mathbf{X} \to \lambda = C_m(x) \in \mathbb{R}^m$ and the reconstruction procedure $R_m\colon \lambda \in \mathbb{R}^m \to x = x(\lambda) = R_m(\lambda) \in \mathbb{R}^p$. The sought-for procedure should minimize the reconstruction error

$$\delta_m(\Sigma) = \Big(\sum\nolimits_i \big\|x_i - R_m\big(C_m(x_i)\big)\big\|^2\Big)^{1/2}.$$

The value of m that gives an estimation of the internal dimension of the data set $\mathbf{X}$ is selected as the minimum dimension at which the error $\delta_m(\Sigma)$ does not exceed the specified reconstruction error level.

C_m and R_m are usually sought for in the parametric class of functions and $\delta_m(\Sigma)$ minimization task amounts to performing the minimization over a set of the functions' parameters. If the task involves the classes of linear transformations, the solution is given by the PCA method. There are several non-linear dimension reduction procedures that are dictated by the specific classes of transformations: replicative artificial neural networks, radial basis functions, etc. Some new effective dimension reduction procedures based on construction of non-linear framed orthogonal design manifolds are proposed in [8].

Metamodelling allows dimension reduction problems to be handled using diverse domain-specific knowledge and models, thus giving rise to new unconventional dimension reduction tasks, which if successfully solved, largely improve the quality of the procedures. The subject field knowledge may come in the form of applied parametric models describing the objects [14] or knowledge about additional characteristics of the experiments the data were obtained from [2].

If the data set $\mathbf{X}$ has been successfully reduced to smaller dimension, then the $F_M(x)$ in approximation task can be approximately replaced by another approximation task, in which the approximation $f_{\mathrm{SM}}(\lambda \,|\, D_{N,m})$ for the function $y = f_M(\lambda) \equiv F_M\big(R_M(\lambda)\big) \in \mathbb{R}^q$ depending on the parameter λ of smaller dimension is constructed on the basis of data set

$$D_{N,m} = \big\{\big(\lambda_i = C_m(x_i), y_i = F_M(x_i)\big),\ i = 1, \ldots, N\big\}.$$

The resulting surrogate model $F_{\mathrm{SM}}(x \,|\, D_N, \Sigma)$ will take the form $f_{\mathrm{SM}}(C_m(x) \,|\, D_{N,m})$. However for the surrogate model to be accurate, the dimension reduction procedure Σ should not only ensure the proximity in the space of arguments x and thus a low reconstruction error $\delta_m(\Sigma)$, but also ensure the functional proximity $F_M(x) \approx F_M\big(R_m\big(C_m(x)\big)\big)$ [3]. Only $F_M(x) \approx f_M(C_m(x))$ functional proximity is required in the example of a dimension reduction procedure applied to the approximation tasks and described in [13].

The dimension reduction procedure Σ defines in $\mathbb{R}^p$ the m-dimensional parametric manifold $\mathbf{G}_m = \{R_m(\lambda),\ \lambda \in \mathbb{R}^m\}$ that approximates the data set $\mathbf{X}$. For the selected reconstruction procedure $R_m(\lambda)$ the optimum dimension reduction procedure $C_m(x)$ amounts to the projection onto the manifold $\mathbf{G}_m$: $C_m(x) = \arg\min_\lambda \big\|x - R_m(\lambda)\big\|$. In the case of a fixed compression procedure C_m, the construction of the best reconstruction procedure R_m that minimizes the error $\delta_m(\Sigma)$ take the form of the following approximation procedure: use the data set $\big\{\big(x_i, \lambda_i = C_m(x_i)\big),\ i = 1, \ldots, N\big\}$ to construct the function $x = R_m(\lambda)$ that minimizes the error $\Big(\sum_i \big\|x_i - R_m(\lambda_i)\big\|^2\Big)^{1/2}$ [4].

Conclusions

1. At present moment metamodeling is one of the most popular methods for analysis and optimization of complex technical objects in specific engineering applications. Due to this reason an attention is paid to development of theoretical foundations of metamodeling, which results in a big number of publications and monographs published mainly in english.

2. In overwhelming majority of publications process of construction of surrogate models using metamodeling techniques is substantially reduced to regression problem. However our detailed analysis of problems of predictive metamodeling has showed that adequate problem statement in predictive metamodeling should consist in solution of a series of interrelated intelligence data analysis tasks in which the outputs of one specific task are used as input data for another

task and the objective functions cannot be specified independently for each particular task [5, 6, 17].

3. The last point can be illustrated using an example of surrogate model construction in the situation when input parameters of the model belong to unknown manifold of smaller dimension. In case the dimension of input space **X** is high standard methods for surrogate model construction based on approximation usually do not work. At the same time incorporation of dimension reduction procedure into the process of surrogate model construction allows construction of effective surrogate model.

References

[1] *Bernstein A. V., Kuleshov A. P., Sviridenko Yu. N., Vyshinsky V. V.* Fast Aerodynamic Model for Design Technology // In Proceedings of West-East High Speed Flow Field Conference, Moscow, 2007.

[2] *Bernstein A. V., Kuleshov A. P.* Dimension reduction problem with explanatory variables (predicates) // Information Processes. Electronic Scientific Journal. — 2008. — Vol. 8, No. 1. — Pp. 47–57.

[3] *Bernstein A. V., Kuleshov A. P.* Cognitive technologies in the problem of dimension reduction of geometrical object descriptions // Information technologies and computer systems. — 2008. — Vol. 2. — Pp. 6–19.

[4] *Bernstein A. V.* Approximation of dependencies as a dimension reduction problem // Survey in Applied and Industrial Mathematics, Ser. "Probability and Statistics". — 2009. — Vol. 16, No. 5.

[5] *Bernstein A. V., Kuleshov A. P.* Mathematical Methods in Engineering Cognitive Technologies // Survey in Applied and Industrial Mathematics, Ser. "Probability and Statistics". — 2008. — Vol. 15, No. 3. — Pp. 451–452.

[6] *Bernstein A. V., Burnaev E. V., Kuleshov A. P.* Intellectual Data Analysis in Metamodeling // Proceedings of XVII All-Russian Seminar "Neuroinformatics and its applications to Data Analysis". Krasnoyarsk, 2009. — Pp. 23–28.

[7] *Bernstein A. V., Burnaev E. V., Kuleshov A. P.* On a methodology for constructing approximations of multidimensional dependences // Plenary and Selected Papers of the Fourth International Conference "Parallel Computations and Control Problems", Moscow, 2008. — Pp. 56–62.

[8] *Bernstein A. V., Kuleshov A. P.* Construction of orthogonal non-linear manifolds in the problem of dimension reduction // Proceedings of VII-th International School-Seminar "Multivariate statistical analysis and Econometrics", Tsahkadzor, Moscow, 2009. — Pp. 25–27.

[9] *Burnaev E. V., Grihon S.* Construction of the Metamodeles in Support of Stiffened Panel Optimization // Extended abstracts of VI International Conference "Mathematical Methods in Reliability. Theory. Methods. Applications" (MMR-2009), Moscow, 2009. — Pp. 124–128.

[10] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V., Chernova S. S.* Neural Approximation based on regression and boosting // Extended abstracts of VI International Conference "Mathematical Methods in Reliability. Theory. Methods. Applications" (MMR-2009), Moscow, Russia, 2009. — Pp. 119–123.

[11] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V.* About hybrid algorithm for tuning of parameters in approximation based on linear expansions in parametric functions // Proc. of 8th Intelligent Information Processing. — 2010. — Pp. 200–203 (in this book).

[12] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Lokot A. S.*. Model selection in function approximation problem based on statistical learning theory // Proceedings of 9th International Conference Computer Data Analysis and Modeling: Complex Stochastic Data and Systems, Minsk, Belarus, 2010.

[13] *Burnaev E. V., Prihodko P. V.* Dimension Reduction for Function Approximation based on Piecewise-Linear Regression // Proc. of 8th Intl. Conf. Intelligent Information Processing. — 2010. — Pp. 204–207 (in this book).

[14] *Chernova S. S., Ivanova E. P.* Reduction of complex geometrical object dimension in the presence of particular parametric models // Artificial Intelligence and Decision Making. — 2009. — Vol. 3. — Pp. 53–58.

[15] *Forrester A., Sobester A., Keane A.* Engineering Design via Surrogate Modelling. A Practical Guide. — Wiley, 2008. — 238 p.

[16] *Kuleshov A. P., Bernstein A. V., Burnaev E. V.* Metamodelling with using domain-specific knowledge // Proc. of 8th Intl. Conf. Intelligent Information Processing. — 2010. — Pp. 208–211 (in this book).

[17] *Kuleshov A. P.* The problems of multivariate statistical analysis in computer design systems // Proceedings of VII-th International School-Seminar "Multivariate statistical analysis and Econometrics", Tsahkadzor, Moscow, 2008. — Pp. 60–61.

[18] *Kuleshov A. P.* Cognitive technologies in adaptive models of complex objects // Information technologies and computer systems. — 2008. — Vol. 1. — Pp. 18–29.

[19] *Kuleshov A. P., Bernstein A. V.* Cognitive technologies in adaptive models of complex plants // Keynote papers of 13-th IFAC Symposium on Information Control Problems in Manufacturing (INCOM'09), Moscow, Russia, 2009. — Pp. 70–81.

[20] *Mitchel T.* Machine Learning. — New-York: McGrow Hill, 1997.

[21] *Gary Wang G., Shan S.* Review of Metamodeling Techniques in Support of Engineering Design Optimization // J. Mech. Des. — 2007. — Vol. 129, No. 3. — Pp. 370–381.

Software support of metamodelling

Vetrov D. E.
vetrov@irias.ru
IRIAS, Moscow, Russia

The paper explicates a construction technique and provides a usage example of a software integrator designed to create diverse data processing implementations based on the automatically generated data-specific processing procedures. Also the paper describes a technique used for constructing automatic procedure generators that create software modules implementing basic data analysis and processing procedures. The generators are data-specific and can be used as external libraries in the development of specialized engineering applications.

Программная поддержка метамоделирования

Ветров Д. Е.
Москва, МНИИПУ

В докладе описывается способ построения и пример реализации интегратора программных модулей, обеспечивающего построение различных схем обработки данных на базе автоматически сгенерированных процедур обработки, существенно зависящих от данных. Также в докладе описывается способ построения автоматических генераторов процедур, которые создают программные модули, реализующие базовые процедуры анализа и обработки данных, существенно зависят от данных и могут быть использованы как внешние библиотеки при разработке специализированных инженерных приложений.

Introduction

The design and implementation of a complex engineering object involves the analysis and comparison of various engineering solutions with regard to the object's structure, operating mechanisms, the selection of its parameters and other elements. Significant advance in mathematical modelling and enhanced capabilities of up-to-date computers allow a wide spectrum of studies to be performed without full-scale experiments. Therefore, mathematical modelling which involves series of computational experiments for the investigation of analytical models of an object and its environment has become one of the most common methods of analysis and optimization of an engineering object's structure.

Various computer-aided design systems are being created in order to reduce the design time and full-scale experiment costs and improve the quality of design. They are devised as special-purpose simulation and decision support systems that allow developers to investigate a large number of design alternatives (configuration, parameters, etc.), predict an object's performances and find the best (rational) solutions.

Progress in the development of intelligent data analysis instruments calls for new applied task-specific engineering tools offering a synergy up-to-date data handling methods based on advances in general science and domain-specific techniques. The new tools should also be able to adapt to the specifics of a subject domain by selecting the most effective data processing algorithms and procedures for a specific set of data or a problem-oriented task.

Up-to-date cognitive technologies offer a host of data-based mathematical models that help reduce the design time and enable mass computations. The models are built upon the results of full-scale and/or computational experiments with various objects from the investigated class, with a minimum of knowledge from the subject field, i. e. process physics. In other words, the models are trained on a set of input and output data prototypes and are commonly termed "surrogate models" [1, 2].

The data-based models by nature are certain to work with the input data similar to the set of prototypes the model is based upon. To be applied to another set of prototypes, the model has to be either built anew or re-constructed by solving a statistical task in which the values of one model should be predicted based on the values of another model, with the input data being the same. This prompts an acute need for tools that would provide fully or semi-automatic generation of data-based models.

Thus new challenges are imposed in terms of software support for the data modelling and analysis systems:

— automatic generation of data processing procedures;
— integrating the existing and generated procedures into a single computational model.

The paper explains how to construct and use a software integrator which allows creating various data processing implementations based on the automatically generated data-specific processing procedures. Also the paper describes a technique used for constructing automatic procedure generators that create software modules implementing basic data analysis and processing procedures. The generators are data-specific and can be used as external libraries in the development of specialized engineering applications.

Purposes

Software integrator is a software tool for designing and running computational schemes that the user creates from individual data processing computer models in dialog mode.

Computer model is a software component that implements some mathematical data processing algorithm or its part. Being an element of the software, the computer model is built from dynamic link libraries (DLL). Therefore, the functionality of the computer model's modules is linked to the integrator at the execution phase and not the assembly (compilation) phase.

Computational scheme is an oriented graph in which the nodes are associated with individual computer models and the arcs show consecutive interactions between the models.

Computer models included in the computational scheme can be either selected from a set of existing models or created anew. There must be a possibility to connect automatic procedure generators to the software integrator for the user to create new computer models while designing the computational scheme.

The software integrator groups both the individual data processing procedures and their generators into a single data processing and analysis system. External to the software integrator, either of these components can be used independently of one another in designing other engineering applications, with the software integrator operating as a graphic shell the computer models are linked to. Note that the computer models stay passive at the software integrator assembly phase and are activated by calling their functions.

Thus the software integrator provides the user with a graphic interface for:

— designing computational schemes grouping several computer models from a given set;
— specifying the input data and conducting the experiments;
— saving and viewing the process status with the progress and completion of individual steps and experiment results;
— tuning and refining the computational logic and inter-model communication formats;
— adding new models to the set by generating new procedures implementing data-specific processing algorithms without compilation or assembly of the integrator's software.

Implementation example

The authors designed the software integrator as a Windows application with a graphic user interface allowing the user to:

— create data-based software modules based on a given data set using automatic procedure generators;
— validate the generated procedures by applying them to the specified test data set;
— create computational schemes with the aid of the created procedures;
— conduct computational experiments.

The developed integrator rests upon several automatic procedure generators:

— dimension reduction procedure generator;
— high dimensional approximation procedure generator;
— geometry generation procedure generator.

The software integrator is oriented towards engineers and analysts specializing in data handling. The software engineers can use the data-based software modules designed by the authors to create new applications using C, C++ or Python compilers.

The integrator has the following functionality:

— importing an input file(s) of the specified formats containing the user data set;
— connecting any user software implemented as an import module and conducting experiments with the import module to create an input data set;
— automatic generation of a software model based on the specified input data using the selected procedure generator;
— validating the software model by applying it to the user-specified test data set;
— calculating a set of standard descriptive statistic characteristics commonly used in mathematical software packages;
— comparing the generated procedures belonging to one class in terms of quality.

Application of software integrator

The software integrator was successfully applied to the wing aerodynamic airfoil generation task. The task was addressed as follows. Since the digital description of the initial object comes in the form of a high dimension vector, the first step was to find a manifold of smaller dimension that would provide a fairly accurate approximation of the input data set. The next step was to generate a new object in the smaller dimension space and then reconstruct the full dimension vector. The solution was obtained using the following computational scheme:

— specifying an arbitrary data set consisting of civil passenger aircraft airfoil descriptions and stating the requirement for the accuracy of the dimension reduction procedure to be created;
— automatically creating a dimension reduction procedure using the procedure generator;
— selecting an arbitrary subset from the specified set of airfoils and using it as the input set of prototypes for automatic creation of the random generation procedures;

— applying the procedure generator to automatically create a random airfoil generation procedure;
— generating new airfoils using the automatically created random generation procedure.

The computational experiments performed with automatically generated dimension reduction and geometry generation procedures demonstrated that the computational scheme, when applied to different sets of input prototypes, can be used for generating new aerodynamic airfoils with pre-specified or predicted properties.

Requirements to the procedure generator

Each data processing procedure is centered around the implementation(s) of one or several typical mathematical tasks that an expert in mathematical data analysis methods solves "manually" using standard multi-purpose publicly available software packages, such as MATLAB, MATHEMATICA, STATISTICA, etc. A task has to be solved anew each time the input data set is modified.

The choice of the solution technique is governed by the type of the targeted data structure. For example, the principal component analysis (PCA) is effective for linear data structures only. Some subject fields may already have their own specific dimension reduction procedures devised with regard for the "physical" aspects of the data (parametric models [5]).

A mathematician familiar with various mathematical solution techniques and aware of the impact of a data structure on the quality of a procedure can manually select or construct an effective dimension reduction procedure by analyzing the data structure, combining various algorithms and making comparisons by conducting computational experiments.

Project engineering teams hardly ever have a mathematician on the staff and are unable or unwilling to hire an external expert, confidentiality of the data being one of the reasons.

To summarize, the procedure generator must meet a set of requirements.

Input data for the generator come in the form of a data set supplied by a domain expert and used as a learning data set when creating a new procedure.

A procedure is constructed using the known classes of functions and/or models that may include both universal models indifferent to the data specifics and domain-specific models taking into account the "physical" context of the data.

The classes of models should allow the data processing models to be used one after another. This means that all the models should conform to the same specification of inputs and outputs.

Each of the models can have its own set of parameters. The user should be able to specify a value for each parameter to make the generation process settings more accurate.

The generator's output is a software module that can be used as a component in the development of specialized engineering applications. The software module is implemented as a dynamic link library (DLL) that can be connected to the application and activated without prior assembly or compilation of the application.

An example of the automatic procedure generator implementation

The automatic procedure generator was developed and is successfully used for reducing the dimension of an object's digital description.

The generator implements a solution for the following mathematical task: use the given data set consisting of N n-dimensional vectors $\{X_1, \ldots, X_N\}$ to select dimension $m \leqslant n$ of the compressed vector and construct two procedures:

— a compression procedure that converts an n-dimensional vector X to a compressed m-dimensional vector $\lambda = C(X)$;
— a reconstruction procedure that converts the compressed m-dimensional vector λ to the decompressed n-dimensional vector $X^* = R(\lambda)$.

The quality of this pair of procedures applied to the input vector X is predicated upon the reconstruction error measured as the distance $d(X, X^*) = |X - X^*|$ between the input vector X and the reconstructed vector $X^* = R\big(C(X)\big)$ obtained by successive application of the compression and decompression procedures.

The quality of the dimension reduction procedure R applied to a specified data set is quantified by the root-mean-square decompression error.

The generator implements two independent solutions for the above task:

— minimizing dimension m of the compressed vector while staying at the specified root-mean-square error level ε;
— minimizing the root-mean-square reconstruction error for the specified dimension m of the compressed vector.

The generator core is composed of the following classes of algorithms:

— linear dimension reduction algorithms based on the artificial neural network (PCA) technology;
— non-linear dimension reduction algorithms based on the ANN technology;
— specific parametric models designed to provide analytical descriptions of the airfoil structure.

The automatically generated procedures is constructed as a combination of algorithms from all given classes. On generating process both the parameters of each algorithm and parameters of algorithm combination were selected to minimize the distance

Table 1. Results for ANN- and PCA-based dimension reduction procedures.

Dimension of compressed vector	ANN	PCA
$m = 2$	$4.11 \cdot 10^{-3}$	$4.32 \cdot 10^{-3}$
$m = 4$	$1.96 \cdot 10^{-3}$	$2.09 \cdot 10^{-3}$
$m = 6$	$1.36 \cdot 10^{-3}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$
$m = 8$	$9.65 \cdot 10^{-4}$	$7.74 \cdot 10^{-4}$
$m = 10$	$7.15 \cdot 10^{-4}$	$4.70 \cdot 10^{-4}$

Table 2. Results for automatically generated dimension reduction procedures.

Dimension of compressed vector	Automatically generated procedure
$m = 2$	$3.06 \cdot 10^{-3}$
$m = 4$	$1.89 \cdot 10^{-3}$
$m = 6$	$1.10 \cdot 10^{-3}$
$m = 8$	$6.63 \cdot 10^{-4}$
$m = 10$	$4.64 \cdot 10^{-4}$

$d(X, X^*)$. The automatically generated procedures were compared to standard ANN- and PCA-based dimension reduction procedures. The comparison results are summarized in the tables 1 and 2.

It can be seen from the tables 1 and 2 that automatically generated procedures display uniformly lower mean reconstruction errors as compared to the standard ANN and PCA-based procedures.

References

[1] *Kuleshov A. P.* Cognitive technologies in adaptive models of complex objects // Information technologies and computer systems. — 2008. — Vol. 1. — Pp. 18–29.

[2] *Bernstein A. V., Kuleshov A. P.* Mathematical Methods in Engineering Cognitive Technologies // Survey in Applied and Industrial Mathematics, Ser. "Probability and Statistics". — 2008. — Vol. 15, No. 3. — Pp. 451–452.

[3] *Bernstein A., Burnaev E., Dorofeev E., Sviridenko Y., Chernova S.* Cascade dimension reduction procedures // Proceedings of the 11th National Conference with International Participation on Artificial Intelligence, Dubna, 2008. — Vol. 1. — Pp. 241–250.

[4] *Bernstein A. V., Kuleshov A. P.* Cognitive technologies in the problem of dimension reduction of geometrical object descriptions // Information technologies and computer systems. — 2008. — Vol. 2. — Pp. 6–19.

[5] *Ivanova E., Chernova S.* Reduction of complex geometrical object dimension in the presence of particular parametric models // Artificial Intelligence and Decision Making. — 2009. — Vol. 3. — Pp. 53–58.

Методы консолидации разноточных данных

Бурнаев Е. В., Бернштейн А. В.
burnaev@iitp.ru, a.bernstein@cpt-ran.ru
Москва, ИППИ РАН, ИСА РАН

Разработаны методы, позволяющие увеличить точность метамодели, построенной по данным, имеющим низкую точность, за счет использования дополнительной информации о моделируемом процессе, содержащейся в данных, имеющих высокую точность. При этом для уточнения метамодели требуется существенно меньше «высокоточных» данных, получение которых как правило требует значительных временных затрат, по сравнению с объемом выборки «низкоточных» данных, используемых для построения «грубой» метамодели. Эффективность разработанного метода продемонстрирована как на модельных, так и на реальных примерах.

Fusion of data from sources with different fidelities

Burnaev E. V., Bernstein A. V.
IITP, ISA, Moscow, Russia

Methods are developed which allow increasing accuracy of a metamodel constructed using data with low fidelity by using additional information about the modelled process contained in data with high fidelity. Usually a lot of resources are needed for generation of data with high fidelity. However for proposed method of adjustment of the metamodel sufficiently less data with high fidelity is needed compared to the size of the sample of data with low fidelity used for construction of "rough" metamodel.

Введение

Одной из важнейших целей математического моделирования является сокращение числа дорогостоящих (в материальном и временном смыслах) натурных экспериментов. Однако математические модели, связанные с численным решением сложных дифференциальных уравнений в частных производных с граничными условиями, описывающих объект и среду его функционирования, также являются достаточно трудоемкими и, главное, не обеспечивают точность и достоверность натурных экспериментов.

В работе будут предложены подходы, позволяющие строить метамодели (суррогатные модели, surrogate models [5, 11]) для натурных экспериментов, основанные на использовании вспомогательной метамодели, построенной на основе результатов вычислительных экспериментов с достаточно простой «физической» моделью.

Пусть имеется неизвестная нелинейная зависимость $y = f(x),\ \ x \in \mathbb{R}^m,\ \ y \in \mathbb{R}^1$, две модели M_1 и M_2, задающие функции $y^{(1)} = f_{M_1}(x),\ \ x \in \mathbb{R}^m,$ $y^{(1)} \in \mathbb{R}^1$ и $y^{(2)} = f_{M_2}(x),\ \ x \in \mathbb{R}^m,\ \ y^{(2)} \in \mathbb{R}^1$, которые приближенно оценивают функцию $f(x)$. По сути, модели M_1 и M_2 используются для того, чтобы моделировать один и тот же физический процесс (структура вектора входных параметров x для функций $f(x)$, $f_{M_1}(x)$ и $f_{M_2}(x)$ одинаковая), определяющий функцию $f(x)$. Обозначим также через $D_N^{(2)} = \{x_i,\, y_i^{(2)} = f_{M_2}(x_i)\}_{i=1}^N$ — выборку значений модели M_2.

Будем считать, что модель M_2 — более точная, чем модель M_1, при этом для заданного входа x подсчитать соответствующий выход с помощью модели M_2 стоит «дороже» (например, в смысле вычислений), чем в случае модели M_1, то есть использование модели M_2 «напрямую» невозможно (под моделью M_2 можно, например, понимать натурные эксперименты). Для ускорений вычислений можно было бы построить метамодель $\hat{M}_2$ для модели M_2, однако и это затруднительно, поскольку построение надежной метамодели требует, чтобы выборка $D_N^{(2)}$ имела достаточно большой объем. Таким образом, возникает задача консолидации разноточных данных, которая состоит в том, чтобы используя выборку $D_N^{(2)}$ и «знание», содержащееся в модели M_1 о моделируемом физическом процессе, построить такую функцию (метамодель $\hat{M}_2 \,|\, M_1$)

$$y^{(2|1)} = \hat{f}_{\hat{M}_2|M_1}\big(x \,|\, f_{M_1}(x)\big),\ \ x \in \mathbb{R}^m,\ y^{(2|1)} \in \mathbb{R}^1,$$

которая «аппроксимирует» модель M_2 лучше, чем обычный аппроксиматор, построенный на основе выборки данных $D_N^{(2)}$.

Замечание. Примером знания, содержащегося в модели M_1 о моделируемом процессе, может быть значение $y^{(1)} = f_{M_1}(x)$ и/или значение $\|\nabla f_{M_1}(x)\|$, характеризующее поведение функции отклика в окрестности точки x.

Результатом решения поставленной задачи должна быть процедура, в которой

Вход:

- вектор x, задающий описание характеристик моделируемого процесса;
- «знание», содержащееся в модели M_1 о моделируемом процессе.

Международная конференция «Интеллектуализация обработки информации» (ИОИ-8), Кипр, г. Пафос, 17–24 октября 2010 г.
International conference "Intelligent Information Processing" IIP-8, Cyprus, Paphos, October 17–24, 2010.

Выход: Предсказание $y^{(2|1)} = \hat{f}_{\hat{M}_2}\big(x \,|\, f_{M_1}(x)\big)$ значения $y^{(2)} = f_{M_2}(x)$ модели M_2 для входного вектора x.

Аппроксимация многомерных зависимостей

Решение поставленной задачи в значительной степени опирается на методы аппроксимации многомерных зависимостей, поэтому в данном разделе приведем постановку задачи аппроксимации многомерных зависимостей и кратко опишем один из возможных способов решения этой задачи.

Пусть $y = F(x)$, $x \in \mathbb{R}^m$, $y \in \mathbb{R}^1$ — аппроксимируемая зависимость, известна выборка $\Sigma_N = \{y_i, x_i\}_{i=1}^N$ ее значений. Случайным образом разобьем Σ_N на две части $\Sigma_N = \Sigma_{\text{learn}} \cup \Sigma_{\text{test}}$, где объем Σ_{test} составляет некоторую долю (обычно 10–20%) от объема выборки Σ_N. Задача аппроксимации $y = F(x)$ заключается в том, чтобы, используя Σ_{learn}, построить такую зависимость (аппроксиматор) $y = \tilde{F}(x)$, для которой функция ошибки $D(F, \tilde{F} \,|\, \Sigma_{\text{test}}) \leqslant \varepsilon$, где ε — заданное число. В качестве функции ошибки часто используют

$$D(F, \tilde{F} \,|\, \Sigma_{\text{test}}) = \sqrt{\sum_{\{y,x\}\in\Sigma_{\text{test}}} \big(y - \tilde{F}(x)\big)^2 \;/\; \#(\Sigma_{\text{test}})},$$

где $\#(\Sigma_{\text{test}})$ — объем подвыборки Σ_{test}.

В [2, 15, 16] предложен метод построения аппроксиматора $y = \tilde{F}(x)$ на основе разложения по заранее фиксированному адаптивному базису, то есть $\tilde{F}(x) = \sum\limits_{i=1}^{p} \alpha_i \psi_i(x)$, где $\psi_i(x) = \varphi(\gamma_i, x)$ — адаптивные базисные функции, γ_i — вектор параметров, $\varphi(\gamma, x)$ — функция, задающая «структуру» базиса, $\{\alpha_i\}_{i=1}^p$ — коэффициенты разложения. Функция $\varphi(\gamma, x)$ может быть определена разными способами, например, как $\varphi(\gamma, x) = \sigma\Big(\big(\sum\limits_{i=1}^{m} a_i x^i\big)^{2\sigma(\beta)}\Big)$, $\sigma(x) = 1/\big(1+\exp(-x)\big)$, $a_i \in \mathbb{R}^1$, $\beta \in \mathbb{R}^1$ — обобщенная сигмоидальная функция, где $x = (x^1, \ldots, x^m)$, $\gamma = (a_1, \ldots, a_m, \beta)$. Эксперименты на искусственных и реальных данных показали, что разработанные в [2, 15, 16] алгоритмы настройки параметров аппроксиматора позволяют получить более точные результаты по сравнению со стандартными методами типа кригинга, многомерной непараметрической регрессии и т. п.

Консолидация данных на основе гауссовской модели

Описанная задача консолидации данных впервые была рассмотрена в работах [1, 4, 6, 7, 9, 12, 13] и метод, предложенный для решения этой задачи, основывался на гауссовской модели.

Известно, что если ξ и η — две гауссовские случайные величины, то оптимальный в среднеквадратичном прогноз значения ξ по η задается условным математическим ожиданием, имеющим структуру $\mathsf{E}(\xi \,|\, \eta) = a\eta + b$, где $a = \frac{cov(\xi,\eta)}{\mathsf{D}\eta}$, $b = \mathsf{E}\xi - a\mathsf{E}\eta$. Зачастую для моделирования многомерных зависимостей используют гауссовские процессы [10], т. е. предполагается, что моделируемая функция является реализацией гауссовского процесса. Именно поэтому в работах [1, 4, 6, 7, 9, 12, 13] метамодель $\hat{M}_2 \,|\, M_1$ имела структуру

$$y^{(2|1)} = \hat{f}_{\hat{M}_2|M_1}\big(x \,|\, f_{M_1}(x)\big) = \rho(x) f_{M_1}(x) + \delta(x),$$

где функции $\rho(x)$ и $\delta(x)$ моделировались с помощью кригинга [5].

В дальнейшем будем моделировать функции $\rho(x)$ и $\delta(x)$ с помощью разложения по адаптивному базису с учетом информации о локальном поведении функции $y^{(1)} = f_{M_1}(x)$, а именно,

$$\rho(x) = \textstyle\sum_{k=1}^{p_\rho} \alpha_{k,\rho} \psi_k^\rho(x), \qquad \psi_k^\rho(x) = \varphi(\gamma_k^\rho, x);$$
$$\delta(x) = \textstyle\sum_{k=1}^{p_\delta} \alpha_{k,\delta} \psi_k^\delta\big(\omega(x)\big), \qquad \psi_k^\delta = \varphi(\gamma_k^\delta, x),$$

где $\omega(x)$ — какой-либо входной вектор, содержащий информацию о локальном поведении функции $f_{M_1}(x)$, например, $\omega(x) = \big(x^1, \ldots, x^m, \|\nabla f_{M_1}(x)\|\big)$. Отметим, что получение локальной информации о поведении функции $f_{M_1}(x)$ напрямую может быть затруднено. В то же время, построение метамодели $\hat{M}_1$ для модели M_1, например, на основе разложения по адаптивному базису, позволяет легко оценить локальное поведение функции $f_{M_1}(x)$, поскольку в таком случае подсчеты уже будут проводиться с использованием явных формул.

Для оценки параметров метамодели $\hat{M}_2 \,|\, M_1$ необходимо решить оптимизационную задачу

$$\sum_{i=1}^{N} \big\| y_i^{(2)} - \rho(x_i) f_{M_1}(x_i) - \delta\big(\omega(x_i)\big) \big\|^2 \to \min_{\substack{\{\alpha_{k,\rho}, \gamma_k^\rho\}_{k=1}^{p_\rho} \\ \{\alpha_{k,\delta}, \gamma_k^\delta\}_{k=1}^{p_\delta}}}.$$

В силу того, что функции $\rho(x)$ и $\delta(x)$ линейно зависят от параметров $\{\alpha_{k,\rho}\}_{k=1}^{p_\rho}$ и $\{\alpha_{k,\delta}\}_{k=1}^{p_\delta}$, то для решения задачи можно использовать гибридный алгоритм, разработанный в [2, 15].

Консолидация данных на основе разложения по адаптивному базису

Так как модель M_1 является существенно менее трудоемкой по сравнению с моделью M_2, то разумно предположить, что имеются результаты $D_K^{(1)} = \{x_i,\ y_i^{(1)} = f_{M_2}(x_i)\}_{i=1}^K$ экспериментов с моделью M_1, которых достаточно для построения точной метамодели $\hat{M}_1$ для модели M_1, определяемой функцией $\hat{y}^{(1)} = \hat{f}_{\hat{M}_1}(x)$, построенной по множеству $D_K^{(1)}$, и аппроксимирующей функцию $y^{(1)} = f_{M_1}(x)$. Как следует из [8], метамодели обычно имеют следующий аналитический вид:

$$\hat{y}^{(1)} = \hat{f}_{\hat{M}_1}(x) = \sum_{k=1}^{p} \alpha_{k,1} \psi_k^1(x), \quad \psi_k^1(x) = \varphi(\gamma_k^1, x),$$

$k = 1, \ldots, p$, где p — количество слагаемых и коэффициенты $\{\alpha_{k,1}, \gamma_k^1\}_{k=1}^p$ определяются обучающим множеством $D_K^{(1)}$. Другими словами, суррогатная модель $\hat{M}_1$ является моделью линейной регрессии с параметрами $\{\alpha_{k,1}\}_{k=1}^p$ и с использованием адаптивного базиса $\Psi^{(1)} = \{\psi_k^1(x)\}_{k=1}^p$.

Предполагаемая взаимная близость функций $f(x)$, $f_{M_1}(x)$, $f_{M_2}(x)$ и $\hat{f}_{\hat{M}_1}(x)$ позволяет считать, что функция $f_{M_2}(x)$ достаточно хорошо может быть приближена линейными комбинациями функций из набора $\Psi^{(1)} = \{\psi_k^1(x)\}_{k=1}^p$. Поэтому в качестве суррогатной модели $y^{(2|1)} = \hat{f}_{\hat{M}_2|M_1}\big(x \,|\, f_{M_1}(x)\big)$, построенной по множеству $D_N^{(2)}$, предлагается использовать функцию $y^{(2|1)} = \hat{f}_{\hat{M}_2|\hat{M}_1}\big(x \,|\, \hat{f}_{\hat{M}_1}(x)\big) = \sum\limits_{k\in I} \alpha_{k,2}\psi_k^1(x)$, в которой базисные функции $\Psi^{(1)} = \{\psi_k^1(x)\}_{k=1}^p$ унаследованы из суррогатной модели $\hat{y}^{(1)} = \hat{f}_{\hat{M}_1}(x)$, регрессионные коэффициенты $\{\alpha_{k,2}\}_{k\in I}$ построены по обучающему множеству $D_N^{(2)}$ методом наименьших квадратов, а $I \subseteq \{1, \ldots, p\}$ — некоторое подмножество из набора индексов $\{1, \ldots, p\}$ (вообще говоря, используются не все адаптивные базисные функции из $\Psi^{(1)}$).

Таким образом, предлагается следующий алгоритм построения метамодели $\hat{M}_2|\hat{M}_1$:

1. Используя метод включений-исключений [14], выбрать такое подмножество $I \subseteq \{1, \ldots, p\}$ базисных функций $\{\psi_k^1(x)\}_{k\in I}$, что на выборке $D_N^{(2)}$ регрессоры $\{\psi_k^1(x_i)\}_{k\in I}$, $i = 1, \ldots, N$, лучше всего «объясняют» вариацию значений $y_i^{(2)}$, $i = 1, \ldots, N$.
2. Оценить методом наименьших квадратов коэффициенты $\{\alpha_{k,2}\}_{k\in I}$ на основе выборки $D_N^{(2)}$, используя $\{\psi_k^1(x_i)\}_{k\in I}$, $i = 1, \ldots, N$ в качестве регрессоров.

Предлагаемый подход позволяет построить метамодель $\hat{M}_2$ модели M_2 в ситуации, когда количество результатов экспериментов $D_N^{(2)}$ недостаточно для построения адаптивного базиса $\Psi^{(2)} = \{\psi_k^2(x)\}_{k=1}^p$ для модели M_2, но достаточно для построения линейной регрессионной зависимости.

В случае, если модели M_1 и M_2 значительно различаются, можно ввести поправку δ в метамодель $\hat{M}_2 \,|\, \hat{M}_1$ (также моделируемую разложением по адаптивному базису), то есть $y^{(2|1)} = \hat{f}_{\hat{M}_2|\hat{M}_1}\big(x \,|\, \hat{f}_{\hat{M}_1}(x)\big) = \sum\limits_{k\in I} \alpha_{k,2}\psi_k^1(x) + \delta(x)$, которая может компенсировать значительные различия между моделями M_1 и M_2.

Модельный пример

Пусть модель M_2 определяется функцией

$$f_{M_2}(x) = \left|\sum_{i=1}^m \cos^4(x^i) - 2\prod_{i=1}^m \cos^2(x^i)\right| \left(\sum_{i=1}^m i(x^i)^2\right)^{-\frac{1}{2}},$$

Таблица 1. Значения ошибки аппроксимации функции $y^{(2)} = f_{M_2}(x)$.

Способ построения	Ошибка
SM-ABF	0,0231
GM-kriging	0,0196
GM-ABF	**0,0121**
DF-ABF	**0,0155**

Таблица 2. Значения ошибки аппроксимации функции $y^{(2)} = f_{M_2}(x)$.

Способ построения	Ошибка
SM-ABF	0,0113
GM-kriging	0,0091
GM-ABF	**0,0067**
DF-ABF	**0,0043**

где $0 < x^i < 10$, $i = 1, \ldots, m$, $\prod_{i=1}^m x^i > 0{,}75$ и $\sum_{i=1}^m x^i < 15\,m/2$, а модель M_1 определяется функцией $f_{M_1}(x) = f_{M_1}(x)\exp\big[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m (x^i - 5)^2/\sigma^2\big] + h$, где параметры σ и h определяют степень искажения. Рассмотрим случай $m = 2$, $\sigma = 4$ и $h = 0{,}1$.

Объем выборки $D_N^{(2)}$ равнялся $N = 1000$, объем выборки $D_K^{(1)}$ равнялся $K = 5000$. Были построены следующие метамодели

— SM-ABF — метамодель для M_2 на основе разложения по адаптивному базису;
— GM-kriging — метамодель на основе гауссовской модели, коэффициент которой оценивались с помощью кригинга;
— GM-ABF — метамодель на основе гауссовской модели, коэффициенты в которой оценивались с помощью разложения по адаптивному базису;
— DF-ABF — метамодель на основе разложения по адаптивному базису.

Качество построенной метамодели оценивалось с помощью средней абсолютной ошибки аппроксимации функции $y^{(2)} = f_{M_2}(x)$ (см. таблицу 1).

Таким образом, использование разработанных методов GM-ABF и DF-ABF позволило получить значительно меньшие ошибки аппроксимации по сравнению с ошибками аппроксимации стандартных методов.

Консолидация аэродинамических данных

Для расчета аэродинамических характеристик самолета обычно применяются современные сеточные методы. В данном разделе приводится пример использования разработанных методов консолижации данных для решения задачи прогноза значений CFD-кода (Computational Fluid Dynamics) BLWF58 (модель M_2) по соответствующим значениям панельного кода PANSYM (модель M_1) [17, 18].

В качестве выходной переменной y будем использовать значения коэффициента подъемной силы.

С использованием CFD-кода BLWF58 (модель M_2) и панельного кода PANSYM (модель M_1) было проведено 1200 вычислительных экспериментов для 150 различных компоновок при двух значениях числа Маха 0,6 и 0,7 и различных значениях углов атаки и нулевых значениях угла скольжения. Результаты вычислительных экспериментов были использованы для построения метамодели $\hat{M}_2$, а результаты оставшихся 200 экспериментов были использованы для подсчета ошибок аппроксимации модели M_2. Были построены метамодели тех же типов, что и в предыдущем эксперименте. Качество построенной метамодели оценивалось с помощью средней абсолютной ошибки аппроксимации функции $y^{(2)} = f_{M_2}(x)$ (см. таблицу 2). Отметим, что средняя абсолютная погрешность панельного кода PANSYM по отношению к более точному CFD-коду BLWF58 составляет 0,0131.

Из таблицы 2 следует, что использование разработанных методов GM-ABF и DF-ABF позволило получить значительно меньшие ошибки аппроксимации по сравнению с ошибками аппроксимации стандартных методов.

Таким образом, методы консолидации данных могут быть использованы для пересчета данных, полученных разными методами (различными сеточными методами, с помощью натурных экспериментов и т. п.), и формирования единой базы данных, состоящей из существенно более однородных данных. Такая база данных может быть использована для сравнительного анализа компоновок самолета.

Литература

[1] *Bandler J. W., Cheng Q. S., Dakroury S. A., Mohamed A. S., Bakr M. H., Madsen K., Sondergaard J.* Space mapping: the state of art // IEEE Transactions on Microvawe Theory and Techniques. — 2005. — Vol. 52, No. 1. — Pp. 337–361.

[2] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V., Chernova S. S.* Neural Approximation based on regression and boosting // Ext. abstr. of VI Intl. Conf. “Mathematical Methods in Reliability. Theory. Methods. Applications” (MMR-2009), Moscow, Russia, 2009. — Pp. 119–123.

[3] *Burnaev E. V., Grihon S.* Construction of the Metamodeles in Support of Stiffened Panel Optimization // Ext. abstr. of VI Intl. Conf. “Mathematical Methods in Reliability. Theory. Methods. Applications” (MMR-2009), Moscow, 2009. — Pp. 124–128.

[4] *El-Beltagy M. A., Wright W. A.* Gaussian Processes for Model Fusion // Lecture Notes in Computer Science, Artificial Neural Networks — ICANN 2001, Springer, 2001. — Vol. 2130. — Pp. 376–383.

[5] *Forrester A., Sobester A., Keane A.* Engineering Design via Surrogate Modelling. A Practical Guide. — Wiley, 2008. — 238 p.

[6] *Forrester A., Bressloff N. W., Keane A. J.* Optimization using surrogate models and partially converged computational fluid dynamics simulations // Proc. R. Soc. A. — 2006. — V. 462. — Pp. 2177–2204.

[7] *Gano S. E., Renuad J. E., Sanders B.* Variable Fidelity Optimization Using a Kriging Based Scaling Function // AIAA journal. — 2005. — Vol. 43, No. 11. — Pp. 2422–2430.

[8] *Kuleshov A. P., Bernstein A. V.* Cognitive technologies in adaptive models of complex plants // Keynote papers of 13th IFAC Symposium on Information Control Problems in Manufacturing (INCOM’09), Moscow, 2009. — Pp. 70–81.

[9] *Qian P. Z. G., Jeff Wu C. F.* Bayesian hierarchical modeling for integrating low-accuracy and high-accuracy experiments // Technometrics. — 2008. — Vol. 50, No. 2. — Pp. 192–204.

[10] *Rasmussen C. E., Williams C. K. I.* Gaussian processes for machine learning. — The MIT Press, 2006.

[11] *Wang G. G., Shan S.* Review of Metamodeling Techniques in Support of Engineering Design Optimization // Journal of Mechanical Design. — 2007. — Vol. 129, No. 4. — Pp. 370–380.

[12] *Ying Xiong, Wei Chen, Kwok-Leung Tsui.* A new variable fidelity optimization framework based on model fusion and objective-oriented sequential sampling // Journal of mechanical design. — 2008. — Vol. 130, No. 11. — Pp. 699–708.

[13] *Zhiguang Qian, Seepersad C. C., Joseph V. R., Allen J. K., Jeff Wu C. F.* Building surrogate models based on detailed and approximate simulations // Journal of mechanical design. — 2006. — Vol. 128, No. 4. — Pp. 668–677.

[14] *Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д.* Прикладная статистика. Исследование зависимостей. — М.: Финансы и статистика, 1985.

[15] *Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V.* About hybrid algorithm for tuning of parameters in approximation based on linear expansions in parametric functions // IIP-8, 2010. — Pp. 200–203 (in this book).

[16] *Bernstein A. V., Burnaev E. V., Kuleshov A. P.* On a methodology for constructing approximations of multidimensional dependences // 4th Intl. Conf. “Parallel Computations and Control Problems”, Moscow, ICS RAS, 2008. — Pp. 56–62.

[17] *Бернштейн А. В., Вышинский В. В., Кулешов А. П., Свириденко Ю. Н.* Быстрый метод аэродинамического расчета для задач проектирования // Труды ЦАГИ. — 2008. — № 2678.

[18] *Вышинский В. В., Свириденко Ю. Н.* Применение технологии быстрого вычисления характеристик сложных технических объектов для расчета аэродинамических характеристик самолета // Информационные технологии. — 2006. — № 3. — С. 12–17.

СРС-методы как методы интеллектуального анализа данных при исследовании реальных хаотических процессов*

Горшенин А. К.[1]***, Королёв В. Ю.***[1,2]***, Шоргин С. Я.***[2]
andygorshenin@gmail.com
Москва, [1]факультет ВМК МГУ, [2]ИПИ РАН

В докладе рассматривается описание использования алгоритмов EM-типа и сеточных методов в качестве методов интеллектуального анализа данных. Предлагаемый подход представляет собой значительное улучшение используемых на сегодняшний день техник (например, ARCH/GARCH-модели) как в области финансов, так и в задачах для турбулентной плазмы.

MSM-methods as Data Mining methods for research of real chaotic processes*

Gorshenin A. K.[1]***, Korolev V. Yu.***[1,2]***, Shorgin S. Ya.***[2]
[1]Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics MSU, [2]IPI RAS, Moscow, Russian Federation

The report examines how to use the EM-type algorithms and grid methods as methods for data mining. The proposed approach represents a significant improvement of well-known methods (i.e., ARCH/GARCH models) as in finance as in the problems of the turbulent plasma.

Введение

В связи с совершенствованием технологий записи и хранения данных существенно возросли объемы необработанной информации в самых различных областях. Деятельность любого предприятия и любой отрасли теперь сопровождается регистрацией и записью всех подробностей его деятельности. Как организовывать эту информацию, и, самое главное, что делать с этой информацией? Без создания методов извлечения из необработанной или частично обработанной информации необходимых данной отрасли или данному предприятию систематических знаний имеющиеся огромные массивы данных практически бесполезны. Data Mining, или интеллектуальный анализ данных (ИАД), согласно определению одного из ведущих мировых специалистов в этой области, Г. Пятецкого–Шапиро (G. Piatetsky–Shapiro) — это процесс обнаружения в сырых данных ранее неизвестных, нетривиальных, практически полезных и доступных интерпретации знаний, необходимых для принятия решений в различных сферах человеческой деятельности. По-другому этот процесс можно охарактеризовать как процесс преобразования сырых данных в систематические знания в рассматриваемой предметной области. Методы ИАД применяются практически везде, где имеются большие объемы данных, подлежащих анализу методами и средствами ИАД.

Настоящий доклад посвящен вопросам разработки методов и средств ИАД для исследования реальных процессов с хаотическим и/или непредсказуемым поведением. Примерами таких процессов могут служить процессы эволюцию финансово-экономических показателей и поведение турбулентной плазмы. Казалось бы, хаотические процессы на финансовых рынках принципиально отличаются от хаотических процессов плазменной турбулентности — их формирование оказывается сильно зависимым от того, знают ли наблюдатели (участники рынка), как развивается процесс, в то время как процессы, протекающие в токамаках или стеллараторах, будут развиваться так, как они должны были развиваться, вне зависимости от того, правильно или неправильно выписаны уравнения, описывающие соответствующие физические процессы. Однако при математическом моделировании финансовых рынков и турбулентных потоков заметны некоторые принципиальные аналогии. Процессы, протекающие на финансовых рынках и в турбулентных потоках, проявляют идентичные свойства: и тем и другим свойственны непредсказуемость, перемежаемость и в той или иной степени (локальная) масштабная инвариантность (или (мульти-) фрактальность). Под перемежаемостью обычно понимают нерегулярное чередование периодов времени, в течение каждого из которых вероятностно-статистические закономерности развития процесса сохраняются примерно неизменными. Масштабная инвариантность позволяет автоматически пересчитывать закономерности, наблюдаемые на конкретных временных масштабах (например, малых), на другие масштабы (например, большие) с помощью простого (степенного или логарифмически-линейного) преобразования.

Несмотря на большое число выдающихся математических результатов в этих областях, ни в финансовой математике, ни в теории турбулентности пока нет всеобъемлющей математической теории, позволяющей с единых позиций описать

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 08-07-00152, № 09-07-12032-офи-м.

все многообразие различных эффектов. Как следствие, и в финансовой математике, и в теории турбулентности имеется очень много феноменологических (в том числе теоретико-вероятностных) моделей, ориентированных на описание конкретных эффектов.

В данном докладе дается описание подхода к реализации ИАД, основанного на одном весьма удобном классе математических моделей стохастических хаотических процессов — так называемых подчиненных винеровских процессов, или процессов броуновского движения со случайным временем. Вследствие отсутствия единой теории, объясняющей все эффекты, наблюдаемые на финансовых рынках и в турбулентных потоках, особую важность приобретают именно внутренние, аналитические механизмы формирования математических (прежде всего, вероятностных) моделей хаотических процессов. В качестве аргументации в пользу указанных моделей используется асимптотический подход, основанный на предельных теоремах теории вероятностей, в частности, на предельных теоремах для обобщенных дважды стохастических пуассоновских процессов (обобщенных процессов Кокса), которые в определенном смысле являются наилучшими математическими моделями неоднородных (и даже нестационарных) хаотических потоков. Такой подход дает возможность получить не только сами формальные вероятностные модели хаотических стохастических процессов, но и в некотором смысле дать разумное теоретическое объяснение их адекватности на основе минимальных предположений о внутренней структуре изучаемых характеристик, что чрезвычайно важно при решении задач анализа хаотических процессов в условиях стохастической неопределенности. В рамках указанных моделей взаимодействие частиц в плазме оказывается формально аналогичным процессу заключения сделок (контрактов купли-продажи) на современных финансовых рынках. Поэтому оказывается, что и для анализа процесса эволюции финансовых индексов, и при обработке данных, накопленных в экспериментах с турбулентной плазмой в токамаках и стеллараторах, может быть эффективно использована одна и та же модель.

Стохастическая волатильность и ее разложение на компоненты

Основным объектом нашего интереса является скорость изменений (изменчивость или волатильность) рассматриваемого процесса. Обычно волатильность ассоциируется с коэффициентом диффузии или его аналогом в негауссовских моделях. Понятие волатильности давно используется в финансовом анализе, однако, насколько известно авторам, в работах, посвященных изучению плазменной турбулентности, это понятие не встречается. По-видимому, дело здесь в том, что в тех формальных конструкциях, которые используются для описания процессов плазменной турбулентности, изменчивость присутствует в совершенно определенном виде — как коэффициент диффузии в соответствующих уравнениях. К сожалению, существующие методы статистического оценивания коэффициента диффузии по экспериментальным данным приводят к крайне неустойчивым оценкам, что приводит к результатам, весьма далеким от реальности. Это обусловлено не сложностями с вычислением эмпирической дисперсии, но слишком упрощенной интерпретацией существующими моделями изменчивости рассматриваемых стохастических хаотических процессов как некоторого постоянного скаляра — числа, которое наделяется смыслом «коэффициента диффузии». В то же время в реальных процессах изменчивость, во-первых, имеет существенно многомерную структуру и, во-вторых, изменчива сама. Поэтому, не сводя изменчивость к коэффициенту диффузии, и при рассмотрении процессов плазменной турбулентности для описания изменчивости в целях единообразия будет использоваться термин «волатильность».

В финансовой математике давно уже активно используется концепция переменной и даже стохастической волатильности. Известно много моделей процессов, описывающих эволюцию финансовых индексов, которые учитывают стохастический характер волатильности. Достаточно упомянуть ARCH (AutoRegressive Conditional Heterosckedastic) и GARCH-модели.

Во всех существующих работах, в которых используется концепция стохастической волатильности, последняя трактуется как некий случайный процесс, каждая траектория которого представляет собой скалярную (то есть одномерную) функцию времени. В противоположность такой традиции, основной результат, излагаемый в данном докладе, — описание и обоснование подхода, основанного на методе скользящего разделения смесей (СРС-методе [1]), который дает возможность интерпретировать волатильность как многомерную (векторную) функцию времени с помощью специального и довольно естественного разложения волатильности на динамическую и диффузионные компоненты. В свою очередь, специальными математико-статистическими процедурами диффузионная составляющая раскладывается на несколько разных компонент, каждая из которых имеет свое собственное происхождение. Таким образом, предлагается метод статистического разложения волатильности скалярного процесса в нетривиальную и существенно многомерную информативную картину.

На примере исследования реальных временных рядов, описывающих эволюцию конкретных фи-

нансовых индексов, показано, что динамическая и диффузионные составляющие вносят в итоговую волатильность примерно одинаковый вклад, причем в разные моменты времени доминировать могут разные компоненты.

Важное значение имеет разработка и реализация численных процедур практической декомпозиции волатильности конкретных хаотических стохастических процессов на основе упомянутых выше моделей. По своей сути эти процедуры являются методами решения задачи статистического разделения конечных смесей вероятностных распределений (то есть задачи отыскания статистических оценок весов и параметров компонент смеси). Для решения таких задач при относительно большом числе компонент традиционно применяется EM-алгоритм. Однако он не лишен недостатков: к примеру, неустойчив по начальным данным, находит локальные, а не глобальные максимумы и т. д. Поэтому авторами предложено использовать, наряду с такими традиционными процедурами разделения смесей, новые — медианные [2] — модификации (в частности, для стохастической модификации EM-алгоритма) этих методов, в определенном смысле являющиеся более устойчивыми. Неприятным свойством EM-алгоритма и других процедур численного разделения смесей, основанных на максимизации «полной» функции правдоподобия, является то, что подобные методы находят не «истинные» значения параметров, но формально наиболее правдоподобные. Таким образом, крайне необходимо иметь альтернативные эффективные методы разделения смесей. Такие методы — так называемые сеточные — также разработаны авторами. В основе рассматриваемых методов лежит подход, основанный на замене исходной смеси близкой к ней смесью, в которой неизвестными являются только веса компонент [1].

С методологической точки зрения, предлагаемый подход к анализу волатильности стохастических процессов в определенном смысле аналогичен дисперсионному анализу: в обоих методах именно поведение изменчивости служит основой для статистических выводов о наличии или отсутствии влияния определенных факторов и тем самым о структуре динамической системы, в которой эволюционирует изучаемый процесс.

Общая схема анализа хаотических стохастических процессов

Общая схема анализа хаотических стохастических процессов, предлагаемая авторами, такова.

1. В качестве «элементарных» математических моделей динамики финансовых индексов или хаотических процессов плазменной турбулентности на очень малых временных масштабах рассматриваются обобщенные дважды стохастические пуассоновские процессы (обобщенные процессы Кокса) со скачками, имеющими конечную дисперсию. В соответствии с принципом максимальной энтропии такие процессы являются наилучшими моделями неоднородных хаотических потоков.
2. Асимптотический подход, основанный на предельных теоремах для обобщенных процессов Кокса как моделей неоднородных хаотических случайных блужданий естественно приводит к макромоделям стохастических хаотических процессов типа подчиненных винеровских процессов.
3. Проблема статистической реконструкции распределений приращений упомянутых процессов сводится к задаче статистического оценивания смешивающего распределения, которое является параметром этой задачи.
4. В самой общей постановке задача статистического оценивания смешивающего распределения является некорректной, так как общие сдвиг/масштабные смеси нормальных законов не являются идентифицируемыми. Поэтому исходная задача заменяется задачей отыскания решения, наиболее близкого к истинному в классе конечных дискретных сдвиг/масштабных смесей нормальных законов, являющейся корректной и имеющей единственное решение. Для решения задачи оценки параметров конечных сдвиг/масштабных смесей нормальных законов используются алгоритмы EM-типа или некоторые специальные модификации.
5. Представление распределений (логарифмов) приращений рассматриваемых процессов в виде конечных сдвиг/масштабных смесей нормальных законов естественно приводит к многомерной интерпретации волатильности (выделение динамической и диффузионной компоненты).
6. Статистические закономерности поведения рассматриваемых процессов, формализованные в пунктах 1) – 2), изменяются во времени, вообще говоря, нерегулярным образом, результатом чего является отсутствие универсального смешивающего закона. Таким образом, чтобы изучить динамику изменения статистических закономерностей в поведении исследуемого хаотического процесса, задача статистического разделения конечных смесей нормальных законов должна быть последовательно решена на интервалах времени, постоянно сдвигающихся в направлении «астрономического» времени. Тем самым параметры смесей (параметры сдвига (дрейфа), масштаба (диффузии) и веса компонент) оцениваются как функции времени. При этом естественно возникают задачи, связанные как с выбором подходящих методов

оценивания параметров сдвига и масштаба, так и с выбором оптимальных параметров вычислительных процедур, реализующих эти методы: начального приближения, ширины скользящего интервала (окна), правила остановки и др.

7. Для адекватной интерпретации результатов и для идентификации феноменологически выделенных (статистически оцененных) компонент, то есть для адекватного сопоставления статистически оцененных компонент с реальными процессами или явлениями, необходимо из многих возможных моделей выбрать наиболее адекватную.

Известные методы декомпозиции волатильности (на сезонные или «структурные» компоненты), как правило, связаны с конкретными параметрическими моделями эволюции финансовых индексов типа ARCH или GARCH, и идентификация или интерпретация отдельных компонент волатильности при этом адекватна только в рамках конкретной модели и является довольно условной, если сама соответствующая модель оказывается неадекватной. Такие модели не учитывают все стохастические закономерности изменения волатильности. Эти модели довольно искусственны и не могут дать исчерпывающий ответ на вопрос, как эволюционирует волатильность во времени. В рамках разработанной авторами модели возможен в некотором смысле обратный подход, при котором естественно (автоматически!) выделяются объективно существующие диффузионные и динамические компоненты волатильности. Эта декомпозиция не зависит от той или иной модели взаимозависимости компонент волатильности. Получаемая декомпозиция волатильности является феноменологической, так что задача интерпретации компонент волатильности, то есть наделения их тем или иным смыслом, становится вторичной. Отличие данного подхода от традиционного заключается в том, что при традиционном подходе компоненты сначала интерпретируются за счет выбора той или иной ARCH- или GARCH-модели, а затем оцениваются статистически, а при предлагаемом подходе компоненты сначала автоматически выделяются (как есть!), то есть статистически оцениваются, и лишь потом — интерпретируются. При этом, повидимому, получается более объективная картина.

Необходимо заметить, что СРС-метод вбирает в себя много статистических процедур. Несмотря на то, что СРС-метод имеет очень серьезные теоретические основания (предельные теоремы для обобщенных процессов Кокса, оценки устойчивости специальных представлений вероятностных распределений в виде смесей, сходимости алгоритмов), некоторые элементы метода основаны скорее на здравом смысле, нежели на строгих математических результатах. Поэтому к СРС-методу надо относиться как к довольно гибкому средству анализа данных, нежели как к идеальному математическому инструменту. Однако СРС-метод обладает большой силой, реально работает и дает чрезвычайно информативные результаты.

Состояние наблюдаемой динамической системы описывается несколькими процессами типа броуновского движения с переменными (случайными) сносом и диффузией. Состояние системы наблюдается в равноотстоящие моменты времени, причем в каждый из них наблюдению доступен лишь один из упомянутых процессов, то есть в каждый момент времени наблюдается значение только одного из этих процессов. Эти броуновские движения могут исчезать и возникать в любые (случайные) моменты времени. При моделировании таких процессов на практике для адекватного описания их развития в каждый момент времени оказывается достаточным не более 5–6 процессов типа броуновского движения с переменной диффузией.

Несколько слов о возможных применениях СРС-метода. Во-первых, это, конечно же, ретроспективный анализ стохастической структуры сложных систем. В части анализа финансовых рынков с помощью СРС-метода можно построить непараметрические, то есть не зависящие от конкретной математической модели типа ARCH или GARCH динамические оценки компонент волатильности, которые затем можно использовать для «настройки» параметрических моделей, сравнивая такие модели с непараметрическими с целью выбора адекватных моделей типа ARCH или GARCH. Во-вторых, это перспективный анализ, то есть прогнозирование эволюции стохастической структуры сложных систем (финансовых, информационно-телекоммуникационных, распределенных вычислительных систем (типа грид), плазмы). В частности, для прогнозирования можно использовать упомянутые выше «настроенные» с помощью СРС-метода ARCH- или GARCH-модели. Но в целом следует признать, что вопросы применимости СРС-метода для решения задач прогнозирования в настоящее время недостаточно проработаны и представляют собой большое поле дальнейших исследований.

Литература

[1] *В. Ю. Королев.* Вероятностно-статистический анализ хаотических процессов с помощью смешанных гауссовских моделей. Декомпозиция волатильности финансовых индексов и турбулентной плазмы. — М.: ИПИ РАН, 2007.

[2] *А. К. Горшенин, В. Ю. Королев, А. М. Турсунбаев.* Медианные модификации EM- и SEM-алгоритмов для разделения смесей вероятностных распределений и их применение к декомпозиции волатильности финансовых временных рядов // Информатика и ее применения. — 2008. — Т. 2., Вып. 4. — С.12–47.

Анализ фондовых и валютных рынков с помощью обобщенного непараметрического метода*

Кондраков И. А., Шананин А. А.
ivankondrakov@mail.ru, alexshan@yandex.ru
Долгопрудный, МФТИ (ГУ)

В статье обобщенный непараметрический метод (ОНМ) применяется к анализу фондовых и валютных рынков. Описано успешное применение новых средств анализа торговой статистики, предоставляемых ОНМ: исследование сегментации рынка, изучение степени рациональности поведения инвестора, построение индекса мирового фондового рынка. Показано, что построенные с помощью ОНМ экономические индексы оказываются более чувствительными к событиям на фондовом рынке, чем индексы, построенные по традиционным методикам.

The analysis of financial and foreign exchange markets with the help of the generalized nonparametric method*

I. A. Kondrakov, A. A. Shananin
Dolgoprudny, MIPT

In this article the generalized nonparametric method (GNM) is applied to the analysis of financial and foreign exchange markets. We describe the successful application of new means of the analysis of trade statistics, provided by the GNM: the research of segmentation, analysis of the rationality of investor behavior, the construction of the world stock market index. We show that economic indices, constructed with the help of the GNM, are more sensitive to the events on the stock market, than indices, constructed using traditional methods.

Обобщенный непараметрический метод

Индексы цен и спроса являются обобщенными характеристиками, позволяющими судить о тенденциях эволюции экономики. Исходной информацией для их построения является торговая статистика, представляющая собой набор цен и объемов покупок в различные периоды времени.

А. А. Конюсом [1] был предложен подход к определению индексов потребительских цен, учитывающий изменение спроса (потребительской корзины) при изменении цен и основанный на паретовской теории потребительского спроса. В основе паретовской теории лежит гипотеза о возможности описания потребительского поведения моделью рационального репрезентативного потребителя, выбирающего наилучший потребительский набор, доступный в силу бюджетных ограничений.

Исходной информацией для вычисления индексов цен и спроса служит торговая статистика $(P^t, X^t)_{t=0}^T$. Здесь $P^t \in \mathbb{R}^m_+$ — вектор цен на товары, $X^t \in \mathbb{R}^m_+$ — вектор объемов потребления, m — количество товаров. Теория выявленного предпочтения позволяет конструктивно проверять по торговой статистике, удовлетворяет ли она гипотезе о рациональности поведения, и вычислять индексы Конюса.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №08-07-00158 и №09-01-13534 офи-ц), РГНФ (грант №08-02-00347), программы ПФИ ОМН РАН №3, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (мероприятия 1.2.1, НК-15 П), ПФИ Президиум РАН П-2.

Теорема 1. *(Африата–Вериана, [2, 3]) Следующие свойства торговой статистики эквивалентны:*

1) *существует функция полезности* $F(X) \in \Phi_0$, *где* Φ_0 *— класс функций, вогнутых, положительно-однородных первой степени, непрерывных на множестве* $\operatorname{int}\mathbb{R}^m_+$, *положительных на множестве* $\operatorname{int}\mathbb{R}^m_+$, *рационализирующая торговую статистику, то есть*

$$X^t \in \operatorname{Argmax}\big(F(X) \;\big|\; \langle P^t, X\rangle \leqslant \langle P^t, X^t\rangle,\ X \geqslant 0\big),$$

где $\langle\cdot,\cdot\rangle$ *— скалярное произведение векторов;*

2) *торговая статистика удовлетворяет однородной аксиоме выявленного предпочтения: для любой цепочки* $\{t_1, t_2, \ldots, t_k\} \subset \{0, 1, \ldots, T\}$ *выполнено*

$$\langle P^{t_1}, X^{t_2}\rangle\langle P^{t_2}, X^{t_3}\rangle \cdots \langle P^{t_k}, X^{t_1}\rangle \geqslant \\ \geqslant \langle P^{t_1}, X^{t_1}\rangle\langle P^{t_2}, X^{t_2}\rangle \cdots \langle P^{t_k}, X^{t_k}\rangle;$$

3) *существует решение системы неравенств*

$$\lambda_t\langle P^t, X^t\rangle \leqslant \lambda_\tau\langle P^\tau, X^t\rangle, \quad \forall t, \tau \in \{0, 1, \ldots, T\} \\ \lambda_t > 0, \quad t = 1, 2, \ldots, T. \qquad (1)$$

В [4, 5] было предложено по положительному решению системы (1) строить временные ряды индексов потребительских цен Конюса $\{1/\lambda_t\}_{t=0}^T$ и индексов спроса Конюса $\{\lambda_t\langle P^t, X^t\rangle\}_{t=0}^T$, которые учитывают изменения структуры потребления. Такой метод построения экономических индексов называется непараметрическим методом.

Погрешности, неизбежно существующие при формировании торговой статистики, могут служить источником нарушения условий рационализируемости. Вопрос о показателе, измеряющем степень рационализируемости торговой статистики, рассматривался в [2, 6, 7], где предложено ввести параметр нерациональности $\omega > 0$ в систему неравенств (1)

$$\lambda_t \langle P^t, X^t \rangle \leqslant \omega \lambda_\tau \langle P^\tau, X^t \rangle, \quad \forall t, \tau \in \{0, 1, \ldots, T\},$$
$$\lambda_t > 0, \quad t = 1, 2, \ldots, T. \qquad (2)$$

Минимальное значение ω, при котором система (2) совместна, служит показателем нерациональности. По положительному решению системы (2) можно построить обобщенные индексы потребительских цен и спроса Конюса. Этот метод будем называть обобщенным непараметрическим методом (ОНМ).

Фондовые рынки

Применим ОНМ для анализа фондовых и валютных рынков. Исходным материалом для анализа является дневная торговая статистика биржевых торгов $(P^t, X^t)_{t=0}^{T}$ начиная с 2004 года по начало 2010. За цену P_i^t берется цена закрытия дня i-ой акции. За X_i^t принимается объем торгов i-ой акции за день в штуках. Для большинства бирж рассмотрено $m = 50$ акций с наибольшим объемом торгов (Россия, Мексика, Италия — по 30).

В данной работе была исследована 21 крупнейшая по объему торгов биржа. Сначала были проанализированы биржи по отдельности. Затем мы исследовали валютный рынок, вопрос о существовании арбитражных цепочек. В конце мы перешли к анализу мирового фондового рынка.

При исследовании отдельных бирж интерес представляют, прежде всего, экономические индексы Конюса, построенные с помощью ОНМ. Эти индексы естественно сопоставить с индексами, рассчитываемыми по традиционным методикам (среднее, взвешенное по цене, среднее, взвешенное по капитализации, суммарный доход на капитал).

Индексы цен Конюса, построенные с помощью ОНМ для акций отдельных бирж, представлены на рисунках 1–3. Приведены индексы, рассчитываемые по разным методам. Рис. 1 — DJIA (США, среднее, взвешенное по цене), рис. 2 — FTSE (Англия, среднее, взвешенное по капитализации), рис. 3 — DAX (Германия, суммарный доход на капитал). На всех рисунках пунктирная линия — это индекс, построенный с помощью ОНМ, сплошная — традиционный фондовый индекс. Во время кризиса 2008–09 годов индексы, построенные с помощью ОНМ, снижаются значительно больше традиционных индексов, а затем растут также быстрее. Особенно это заметно по сравнению с английским фондовым индексом, рассчитываемым как среднее, взвешенное по капитализации.

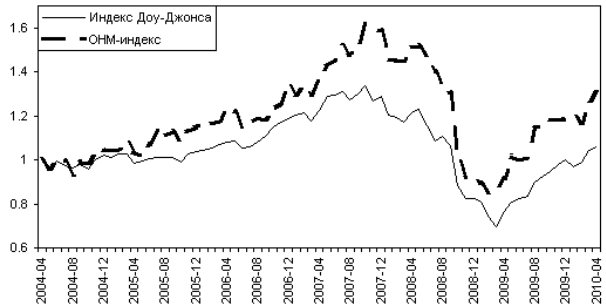


Рис. 1. Фондовая биржа Нью-Йорка.

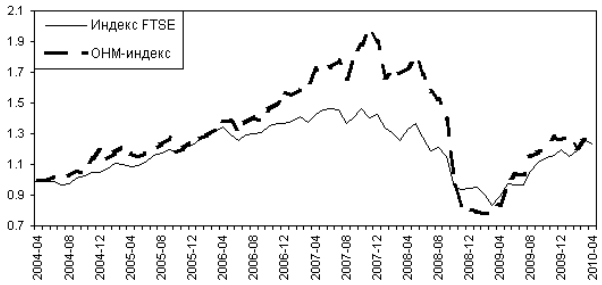


Рис. 2. Фондовая биржа Лондона.

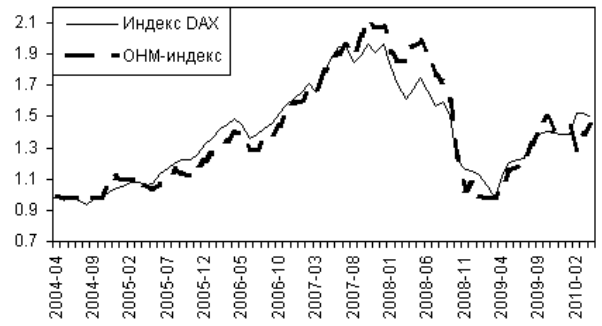


Рис. 3. Фондовая биржа Франкфурта.

Возможность построения индекса Конюса для отдельных бирж объясняется тем, что соответствующая торговая статистика удовлетворяет обобщенной однородной сильной аксиоме с достаточно низким показателем нерациональности ω. Это позволяет говорить о рациональном поведении на фондовом рынке.

Валютный рынок

Исследовав фондовые рынки различных стран, перейдем к анализу связей между ними в рамках мирового рынка. Такое исследование невозможно без анализа валютного рынка, так как различные биржи торгуются в разных валютах. Валютный и фондовый рынки оказываются тесно связанными. Это проявляется при изучении вопроса существования арбитражных цепочек. Для каждого торгового дня с помощью алгоритма Варшалла-Флойда была рассчитана величина минимальной ставки комиссионных сборов r, при которой отсут-

ствуют арбитражные цепочки. Для расчетов были взяты следующие валюты: доллар США, евро, японская йена, английский фунт, швейцарский франк, канадский доллар. Сопоставление величины r с фондовыми индексами различных стран показывает, что этот показатель можно рассматривать как индикатор стабильности мировой финансовой системы (рис. 4).

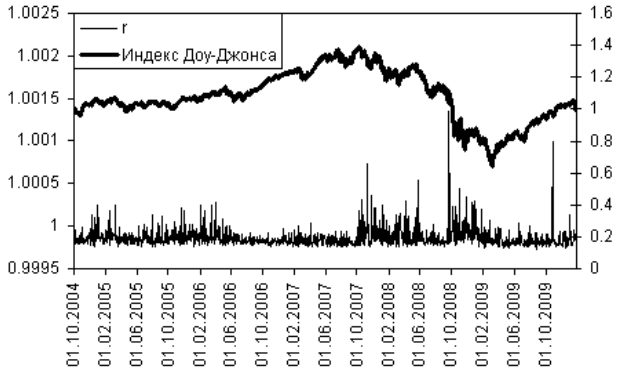


Рис. 4. Минимальная ставка комиссионных сборов r, при которой отсутствуют арбитражные цепочки и индекс Доу-Джонса.

Маленькие значения величины (до 1,0002) совпадают по времени с периодами стабильного роста фондового рынка. Таким образом, непараметрический метод предоставляет средства для изучения взаимосвязи валютного и фондовых рынков.

Мировой фондовый рынок

Взаимосвязь фондовых рынков различных стран представляет не меньший интерес. Действительно, в настоящее время многие крупные инвесторы не ограничиваются рамками одной страны, но действуют в глобальном масштабе. Они перемещают свои капиталы между различными биржами в целях максимизации прибыли и минимизации риска. Более того, такая возможность есть сейчас и у мелкого частного инвестора. Таким образом, исследование нескольких бирж в совокупности дает более полную картину поведения фондового рынка. Непараметрический метод позволяет объединить акции различных бирж, номинированные в разных валютах, в одну торговую статистику и исследовать фондовые рынки в совокупности. Объединение акций с различных мировых бирж в одну торговую статистику дает качественное улучшение рационализируемости.

В таблице 1 приведены средние значения показателя нерациональности ω, рассчитанного с помощью метода скользящего окна продолжительностью в один месяц для некоторых отдельных бирж и всего мирового фондового рынка, упорядоченные по возрастанию. Как видно, значение для мирового фондового рынка является наименьшим. Это говорит о том, что репрезентативный инвестор является глобальным, и рассмотрение мирового фондового рынка в рамках одной торговой статистики дает лучшее понимание его поведения.

Таблица 1. Среднее значение показателя нерациональности ω для отдельных бирж и для мирового фондового рынка.

Мир	1,0060	Япония	1,0147
США(NYSE)	1,0063	Китай	1,0194
Канада	1,0107	Россия	1,0201
Бразилия	1,0130	Корея	1,0259
Англия	1,0135	Индия	1,0280

ОНМ позволяет исследовать сегментацию мирового фондового рынка и сравнительную динамику индексов для различных групп акций. Индекс, рассчитанный с помощью ОНМ по акциям всех бирж показан на рисунке 5 в сравнении с индексом, рассчитанным по акциям Нью-Йоркской фондовой биржи и индексом Доу-Джонса. Мировой индекс отличается большей изменчивостью по сравнению с американским. Видно, что в докризисный период он показал более быстрый рост, а во время кризиса падал сильнее. Это объясняется тем, что рынок США уже давно сложился как развитый и устойчивый. Большое количество инвесторов, действуя в своих, часто разнонаправленных интересах, не позволяет рынку совершать большие колебания.

Рис. 5. Мировой индекс и индекс биржи Нью-Йорка, рассчитанные с помощью ОНМ и индекс Доу-Джонса.

С другой стороны, мировой индекс учитывает развивающиеся рынки, для которых характерны сильные движения. Например, для типичного развивающегося фондового рынка, бразильского, характерен внушительный рост (почти в семь раз с начала исследуемого периода до максимума в середине 2008 года) и не менее внушительное падение во время кризиса. Подобное поведение бразильского и других развивающихся рынков учитывается ОНМ при расчете мирового индекса.

Так же как и различные биржи, различные отрасли мировой экономики испытывают на себе влияние разных факторов и процессов. ОНМ позволяет построить индексы цен акций компаний в различных отраслевых разрезах и сравнить их с мировым индексом фондовых рынков. Так, расчеты показали, что мировой кризис наиболее сильно затронул финансовый сектор. С другой стороны, стабилизирующее влияние на мировой индекс фондовых рынков оказали, прежде всего, акции компаний, производящих потребительские товары, такие как «Кока-Кола» и «Джонсон и Джонсон». В целом такие компании показали меньшее падение во время кризиса. Уверенность в таких акциях инвесторов связана, по-видимому, с тем, что человеку, даже потерявшему веру в банковскую систему, необходимо удовлетворять свои базовые потребности, и компании, производящие потребительские товары, всегда найдут своего клиента.

При исследовании статистики с помощью ОНМ имеется возможность выделить сегменты фондовых рынков. Мы можем рассчитать мировой индекс тремя способами: напрямую по всем акциям, с предварительным агрегированием по биржам и с предварительным агрегированием по отраслям. Максимальное отклонение индекса, рассчитанного напрямую по всем акциям с индексом, рассчитанным после агрегирования по биржам, составляет 4,36 процента, а с индексом, рассчитанным после агрегирования по отраслям, составляет 7,32 процента. Причем максимум достигается в период мирового финансового кризиса. Таким образом, за исключением кризисных ситуаций на рынке присутствует четкая сегментированность как по биржам, так и по отраслям.

Подобная сегментированность фондового рынка означает, что акции одной биржи обладают схожими свойствами для инвестора — являются взаимодополняющими или взаимозаменяющими товарами в терминологии теории потребительского спроса. Таким образом, репрезентативный инвестор при принятии решения о вложении средств сначала выбирает те биржи, на которых он собирается вкладывать деньги, а на втором этапе определяется с набором акций на конкретной бирже. Еще больший интерес представляет выявленная сегментированность мирового фондового рынка по отраслям. Это говорит о второй стратегии вложения средств репрезентативного инвестора: сначала определиться с отраслью, а затем выбирать конкретные акции. Эта стратегия вполне оправдана, учитывая разную динамику акций различных отраслей, рассмотренную выше.

Выводы

При работе со статистикой фондового рынка возникают определенные трудности. Дело в том, что большой пакет акций при переходе от одного крупного инвестора к другому проходит через определенное число спекулянтов. Это число зависит от состояния рынка и связано, по-видимому, с показателем нерациональности. Этот показатель достигает максимума в кризисные периоды и является индикатором стабильности финансовой системы. Таким образом, ОНМ предоставляет новые формальные средства анализа торговой статистики для изучения качественных свойств фондовых и валютных рынков, таких как сегментация по биржам и отраслям мирового рынка, стабильность финансовой системы, рациональность поведения инвестора. Важно, что показатель нерациональности для мирового рынка меньше, чем этот показатель, рассчитанный для отдельных бирж. Это означает, что процесс инвестирования в настоящее время является глобальным и изучение мирового фондового рынка дает качественно более полную картину. С помощью ОНМ был построен мировой индекс. При изучении сегментации по отраслям были выявлены отрасли, наиболее сильно пострадавшие во время финансового кризиса 2008–2009 годов (финансовый сектор), и отрасли, оказавшие стабилизирующее влияние (компании-производители товаров народного потребление). Изучение сегментации по биржам показало, что наибольший вклад в волатильность мирового индекса вносят развивающиеся рынки. В целом построенные с помощью ОНИ экономические индексы более резко отражают события на фондовом рынке.

Литература

[1] *Конюс А. А.* Проблема истинного индекса стоимости жизни // Экономический бюллетень Конъюнктурного института, 1924, № 9–10.

[2] *Afriat S. N.* On a system of inequalities in demand analysis and extension of the classical method // International economic review, 1973. — Vol. 14, No. 2. — Pp. 460–472.

[3] *Varian H.* Non-parametric tests of consumer behavior // The review of economic studies, 1983. — Vol. L(1), No. 160(1). — Pp. 99–100.

[4] *Вратенков С. Д., Шананин А. А.* Анализ структуры потребительского спроса с помощью экономических индексов // М.: ВЦ АН СССР, 1991, 62 с.

[5] *Шананин А. А.* Непараметрические методы анализа структуры потребительского спроса // Математическое моделирование, 1993. — № 9. — С. 3–16.

[6] *Houtman M.* Nonparametric consumer and producer analysis // Dissertation No. 95-32, 1995, University of Limburg, Maastricht, the Netherlands, 208 p.

[7] *Поспелова Л. Я., Шананин А. А.* Показатели нерациональности потребительского поведения и обобщенный непараметрический метод // Математическое моделирование, 1998. — № 4. — С. 105–116.

Генерация многомерных данных, лежащих на многообразии меньшей размерности

Чернова С. С., Ветров Д. Е., Маркевич С. В.
chernova@cpt-ran.ru, vetrov@irias.ru, markevich@irias.ru
Москва, ИСА РАН, МНИИПУ РАН, ИППИ РАН

Описывается метод генерации многомерных объектов внутри множества, имеющего существенно меньшую размерность по сравнению с размерностью описания объекта.

Generation of multidimensional data lying on the manifold of smaller dimension

Chernova S. S., Vetrov D. E., Markevich S. V.
ISA, IRIAS, IITP, Moscow, Russia

The paper describes method for generation of multidimensional object descriptions located in the set having significantly smaller dimension in comparison with the dimension of object description.

Введение

Технология предсказательного метамоделирования [1, 2] позволяет строить по результатам натурных и/или вычислительных экспериментов

$$D_N = \left\{ \left(x_i \in \mathbf{X} \subset \mathbb{R}^p,\ y_i = F_M(x_i) \in \mathbb{R}^q\right)_{i=1}^N \right\}$$

с некоторой исходной моделью $y = F_M(x)$ новую модель SM, определяемую некоторой построенной по данным D_N функцией $y = F_{SM}(x) = F_{SM}(x \mid D_N)$, аппроксимирующей исходную функцию $F_M(x)$ ($F_{SM}(x) \approx F_M(x)$ при $x \in \mathbf{X}$). Построенную по данным модель SM называют метамоделью (моделью над моделью) или суррогатной моделью.

В приложениях в качестве аргумента x обычно выступает цифровое описание некоторого объекта, а в качестве величины y — значение некоторой характеристики этого объекта, полученное путем проведения натурного или вычислительного эксперимента, определяемого исходной моделью. Метамодель SM обычно обладает существенно более высокой вычислительной эффективностью по сравнению с моделью M, и при достаточной точности аппроксимации позволяет использовать метамодель SM вместо модели M для проведения массовых вычислительных экспериментов, в том числе для решения экстремальных и оптимизационных задач.

Существенной особенностью прикладных задач зачастую является высокая размерность входных данных, и цифровые описания объекта состоят из десятков тысяч чисел. В приложениях «осмысленные» (с точки зрения рассматриваемой предметной области) значения входного вектора $x \in \mathbf{X}$ удовлетворяют различным ограничениям, и между его компонентами существуют многочисленные взаимосвязи. Поэтому множество $\mathbf{X}$ таких значений обычно имеет существенно меньшую внутреннюю размерность по сравнению с размерностью p цифрового описания объекта и, следовательно, лежит, по крайней мере, приближенно, в окрестности некоторого многообразия (в общем случае, нелинейного) $\mathbf{G}_m \subset \mathbb{R}^p$ размерности $m \ll p$. В этом случае для проведения вычислительных экспериментов с исходной моделью M необходимо генерировать значения $X_N = \{x_i \in \mathbf{X},\ i = 1, \ldots, N\}$ входного аргумента в окрестности многообразия $\mathbf{G}_m$. Также необходимо «оставаться» вблизи многообразия $\mathbf{G}_m$ при генерации новых значений аргумента x при проведении массовых вычислительных экспериментов, в том числе в процессе оптимизации.

В докладе рассмотрена проблема построения случайных механизмов генерации значений входного аргумента x в окрестности аппроксимирующего многообразия меньшей размерности. Эта особенность проблемы не позволяет использовать стандартные методы генерации (например, методы монтекарловского моделирования). В работе рассматривается один из подходов к решению этой задачи, который можно сформулировать как «генерация сжатых цифровых описаний вблизи прототипов».

Подход к решению

Множество X цифровых описаний объектов, как правило, не имеет формального описания и представлено в виде множества цифровых описаний $\Sigma_n = \{W_1, \ldots, W_n\}$ известных объектов (прототипов). Как следствие, аппроксимирующее многообразие $\mathbf{G}_m$ также неизвестно, и задача его построения по множеству данных Σ_n может быть сформулирована как задача снижения размерности, решение которой описывается набором $\mathbf{T} = \{p, m, K, K^{-1}\}$, состоящим из следующих компонентов:

— p — размерность исходного вектора данных;
— m — размерность сжатого вектора данных;

— K — процедура сжатия данных

$$K\colon W \to K(W) \in \mathbb{R}^m,$$

которая по заданному вектору описания W размерности p строит сжатое описание $\lambda = \lambda(W)$ меньшей размерности m;

— K^{-1} — процедура восстановления данных

$$K^{-1}\colon \lambda \to K^{-1}(\lambda) = W \in \mathbb{R}^p,$$

которая по заданному сжатому описанию λ восстанавливает «полноразмерный» вектор описания $W = W(\lambda)$.

Решение задачи случайной генерации многомерных векторов в окрестности m-мерного многообразия состоит в построении процедуры генерации по следующей заданной входной информации (заданным параметрам процедуры генерации):

— векторы $\Sigma_n = \{W_1, \ldots, W_n\}$, где каждый вектор W_i есть p-мерное цифровое описание i-го объекта-прототипа, $i = 1, \ldots, n$;
— выбранная процедура снижения размерности $T = \{p, m, K, K^{-1}\}$;
— алгоритм A генерации сжатого вектора.

Входом процедуры генерации является запрос на генерацию цифрового описания случайного объекта, обладающего некоторым заданным свойством, задаваемым входным параметром запроса θ. Выходом процедуры генерации является вектор цифрового описания случайно сгенерированного нового объекта.

Заметим, что построение процедуры снижения размерности **T**, заранее построенная по некоторому множеству цифровых описаний объектов-прототипов, в общем случае не совпадающим с множеством Σ_n, не входит в процедуру генерации объектов. Типичным примером является случай, когда процедура **T** построена по некоторому множеству объектов-прототипов, а множество Σ_n состоит из цифровых описаний объектов из этого множества, обладающих некоторым общим свойством.

Архитектура процедуры генерации

Генерация векторов проводится в три этапа.

Этап 1. Вычисляется множество m-мерных векторов

$$\Lambda_n = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\} \subset \mathbb{R}^p, \qquad (1)$$

состоящее из результатов применения преобразования сжатия K к векторам из множества Σ_n:

$$\lambda_i = K(W_i), \quad i = 1, \ldots, n.$$

Этап 2. Вычисляется m-мерный сжатый вектор λ

$$\lambda = A(\Lambda_n \,|\, \theta, \varepsilon),$$

являющийся результатом применения алгоритма $A = A(\cdot \,|\, \theta, \varepsilon)$ к множеству Λ_n, где θ — параметр алгоритма, а ε — стандартный случайный элемент.

Этап 3. Вычисляется полноразмерный вектор описания объекта

$$W = W(A, \theta, \varepsilon) = K^{-1}(\lambda),$$

являющийся результатом применения преобразования восстановления K^{-1} к сгенерированному сжатому вектору λ.

Алгоритм генерации сжатого вектора профиля $A = A(\cdot \,|\, \theta, \varepsilon)$ в качестве входных данных использует:

— множество сжатых векторов Λ_n;
— параметр θ запроса на генерацию;
— значение стандартного случайного элемента ε;

и состоит из двух шагов:

1) построение области генерации;
2) генерация в построенной области.

Таким образом, для решения задачи генерации объектов необходимо разработать алгоритм генерации сжатого вектора $A = A(\cdot \,|\, \theta, \varepsilon)$, определить набор его параметров, а также способы выбора этих параметров.

Алгоритм генерации сжатого вектора

Пусть задана величина $r \geqslant 0$. Тогда обозначим через $S_r(\lambda_k)$ шар радиуса r с центром в прототипе $\lambda_k \in \Lambda_n$, $k = 1, \ldots, n$:

$$S_r(\lambda_k) = \big\{\lambda \in \mathbb{R}^m\colon \|\lambda - \lambda_k\| \leqslant r\big\}.$$

Областью генерации алгоритма является объединение S шаров $S_r(\lambda_k)$, $k = 1, \ldots, n$, в $\mathbb{R}^m$:

$$S = \bigcup_{k=1}^{n} S_k(\lambda_k, r) = \bigcup_{k=1}^{n} \big\{\lambda \in \mathbb{R}^m\colon \|\lambda - \lambda_k\| \leqslant r\big\}$$

и представляет собой множество точек в сжатом пространстве, удаленных от множества сжатых векторов Λ_n на расстояние не больше, чем заданная величина r. Заметим, что в общем случае построенные таким образом шары могут пересекаться.

Случайный элемент $\varepsilon = (\varepsilon_0, \varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_m)$ состоит из случайной величины ε_0, принимающей значения из целочисленного множества $\{1, \ldots, n\}$ с вероятностями $p(\lambda_k)$, $k = 1, \ldots, n$, и m независимых случайных чисел $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_m$, с функциями распределения $F_1(\varepsilon_1), \ldots, F_m(\varepsilon_m)$.

Генерируемый случайный вектор $\lambda = \lambda(\varepsilon) = \{\lambda_1(\varepsilon), \ldots, \lambda_m(\varepsilon)\}$ вычисляется по случайному элементу $\varepsilon = (\varepsilon_0, \varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_m)$ следующим образом:

1. Генерируется случайная величина ε_0, указывающая номер вектора прототипа $\lambda = \lambda(\varepsilon_0) \in \Lambda_n$.
2. Случайный вектор

$$\lambda = \lambda(\varepsilon) = (\lambda_1(\varepsilon_1), \ldots, \lambda_m(\varepsilon_m)) \in S_r(\lambda_0)$$

имеет координаты, которые генерируются случайно в соответствии с заданными функциями распределения $F_1(\varepsilon_1), \ldots, F_m(\varepsilon_m)$.

Таким образом, параметрами полученного алгоритма (параметры запроса θ) являются:

— r — радиус шара, описываемого около сжатых векторов-прототипов в пространстве $\mathbb{R}^m$ сжатых векторов;
— вероятности $p(\lambda_k)$, $k = 1, \ldots, n$;
— функции распределения $F_1(\varepsilon_1), \ldots, F_m(\varepsilon_m)$.

Выбор параметров запроса на генерацию

Предлагается следующий метод определения параметров запроса.

Задание радиуса окрестности r**.** Введем для каждого сжатого вектора $\lambda_i \in \Lambda_n$, $i = 1, \ldots, n$ характеристику, описывающую его положение во множестве Λ_n относительно других векторов. В качестве такой характеристики выберем вектор $D_i = \{d_i^1, \ldots, d_i^k\}$ расстояний от λ_i до его k ближайших соседей в евклидовой метрике в $\mathbb{R}^m$. Пусть

$$r_i(p,k) = \sqrt[p]{\frac{1}{k}\sum_{j=1}^{k}(d_i^j)^p}, \quad i = 1, \ldots, n \qquad (2)$$

есть p-среднее расстояние от вектора $\lambda_i \in \Lambda_n$ до его k ближайших соседей. Тогда определим радиус r

$$r(p,k) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} r_i(p,k), \qquad (3)$$

как среднее по всем p-средним расстояниям (2).

Алгоритм выбора вектора-прототипа состоит из двух шагов:

Шаг 1. Каждому прототипу $\lambda_k \in \Lambda_n$ припишем вес $w_k = G(s_k)$, $k = 1, \ldots, n$, где $G(\cdot)$ есть некоторая функция от s_k числа соседей, попавших в r-окрестность вектора λ_k. Для определенности будем считать, что прототип является соседом сам себе, то есть минимальное число соседей равно 1.

Шаг 2. Построим генератор случайной величины ε_0, которая принимает значения $\{1, 2, \ldots, n\}$ с вероятностями

$$p_k = \frac{w_k}{\sum\limits_{k=1}^{n} w_k}, \quad k = 1, \ldots, n. \qquad (4)$$

Функции $G(\cdot)$ будем искать в классе степенных функций, то есть $G(s) = s^a$, где $a \in R$ — некоторый параметр. Выбор весов позволяет реализовать различные стратегии генерации объектов.

В случае **стратегии усиления плотности**, алгоритм выбора прототипа должен обладать тем свойством, что чем больше плотность r-окрестности некоторой точки в сжатом пространстве, тем чаще в ней генерируется новая точка. Далее приводятся примеры выбора весов и задания вероятности выбора.

Пример 1. Припишем прототипу λ_k вес $w_k = G(s_k) = s_k$, то есть вес есть число соседей, попавших в r-окрестность вектора λ_k. Тогда вероятность выбора прототипа λ_k будет прямо пропорциональна количеству его соседей. В частности, если радиус окрестности $r = 0$, то всем прототипам будет приписан вес равный 1, и все прототипы будут выбираться равновероятно.

Пример 2. Зададим веса так, как это описано в примере 1. Выберем некоторую константу C, и для всех прототипов, для которых $w_k \leqslant C$, положим вероятность его выбора $p(\lambda_k) = 0$. Для остальных прототипов зададим вероятности аналогично формуле 4, где суммирование идет только по прототипам с весом $w_k > C$. Другими словами, с помощью константы C мы можем ввести понятие выброса и не генерировать новые вектора в окрестности этих векторов. В частности, если положить $C = 1$, то ни один из прототипов не будет считаться выбросом.

В случае **стратегии выравнивания плотности** механизм случайной генерации точки в сжатом пространстве работает так, что после генерации достаточно большого количества векторов количество векторов в r-окрестности каждого из исходных векторов-прототипов должно стать приблизительно одинаковым.

Пример 3. Припишем прототипу λ_k вес $w_k = G(s_k) = 1/s_k$, то есть вес есть величина, обратная числу соседей, попавших в r-окрестность вектора λ_k. Тогда вероятность выбора прототипа λ_k будет обратно пропорциональна количеству его соседей.

Пример 4. Зададим веса так, как это описано в примере 3. При этом после каждой генерации будем корректировать количество соседей прототипов, принимая в расчет новые сгенерированные векторы. Тем самым, после каждой генерации вероятности выбора прототипов пересчитываются, а это, в свою очередь, позволяет достичь равномерного заполнения области генерации.

Выводы

Приведенный в работе подход к процедурам генерации объектов основан на нескольких эвристических соображениях:

— формально процедура восстановления может быть применена к любому m-мерному вектору, и в результате будет сформирован n-мерный вектор, но этот вектор может не соот-

ветствовать ни одному сколько-нибудь разумному физическому объекту;
— векторам из множества $K(\Sigma)$ по построению соответствуют корректные физические объекты;
— можно надеяться получить «разумные» описания физических объектов для векторов, лежащих вблизи множества $K(\Sigma)$.

Предложенный алгоритм генерации существенно зависит от данных, учитывает структуру и плотность множества прототипов, гарантирует близость сгенерированного вектора к множеству прототипов, то есть для каждого сгенерированного вектора в его r-окрестности найдется хотя бы один прототип.

Литература

[1] *Kuleshov A. P., Bernstein A. V.* Cognitive technologies in adaptive models of complex plants // Keynote papers of 13th IFAC Symposium on Information Control Problems in Manufacturing (INCOM'09), June 3–5, Moscow, Russia, 2009. — pp. 70–81.

[2] *Бернштейн А. В., Кулешов А. П.* Предсказательное метамоделирование и анализ данных // Сборник докладов международной конференции «Интеллектуализация обработки информации (ИОИ-8)», 10–16 октября, Кипр, г. Ламассол, 2010.

Алгоритм локального поиска для задачи конкурентного размещения предприятий*

Береснев В. Л.
beresnev@math.msc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН

Для задачи конкурентного размещения предприятий, являющейся задачей двухуровневого целочисленного программирования, предлагается способ вычисления нижней и верхней границ значений целевой функции и алгоритм вычисления приближенного решения, представляющий собой процедуру локального поиска по обобщенной окрестности.

Local search algorithm for the competitive facility location problem*

Beresnev V. L.
Sobolev Insitute of Mathematics, Novosibirsk, Russia

We consider the competitive facility location problem that is bilevel integer programming problem. The way of constraction a lower and an upper bounds for the optimal value of the objective function and local search algorithm for finding an approximate solution are proposed.

Рассматривается задача, являющаяся обобщением хорошо известной задачи размещения предприятий (средств обслуживания) на максимум [1]. В этой модели, в отличие от классической задачи размещения предприятий, имеется две соперничающие стороны (Лидер и Последователь), которые открывают свои предприятия, преследуя цель максимизации своей прибыли. При этом каждый потребитель, исходя из собственных предпочтений, среди открытых предприятий выбирает наилучшее и приносит тем самым доход одной из сторон. По аналогии с игрой Штакельберга [8] процесс принятия решений в данной модели представляется состоящим из трех этапов. На первом этапе Лидер открывает свои предприятия. На втором этапе Последователь, зная размещения предприятий Лидера, открывает свои предприятия. Наконец, на третьем этапе каждый потребитель, имея информацию обо всех открытых предприятиях, выбирает наилучшее.

Литературу, в которой обсуждаются различные математические постановки, формализующие указанный трехэтапный процесс, и различные концепции оптимальности, в настоящее время можно считать обширной [3, 5–7]. В то же время предложения по построению работоспособных алгоритмов решения задач конкурентного размещения практически отсутствуют. В [2] дана формулировка задачи конкурентного размещения предприятий в виде задачи двухуровневого целочисленного программирования [4] и предложен метод построения верхней оценки целевой функции для «линейного» случая задачи. В настоящей работе метод построения верхней оценки распространяется на более общий случай и предлагается алгоритм улучшения приближенного решения, получаемого одновременно с вычислением верхней границы.

Формулировка задачи

Обозначим через $I = \{1, \ldots, m\}$ множество предприятий (возможных мест размещения предприятий), а через $J = \{1, \ldots, n\}$ — множество потребителей. Считаем, что для всякого $i \in I$ заданы величины f_i и g_i равные фиксированным затратам на открытие предприятия i соответственно Лидером и Последователем. Для $i \in I$ и $j \in J$ через p_{ij} обозначим величину дохода, получаемого предприятием i при обслуживании потребителя j. Считаем, что для всякого $j \in J$ на множестве I задано отношение порядка $\succ_j$, показывающее предпочтения потребителя j при выборе им предприятия. Отношение $i \succ_j k$ для $i, k \in I$ означает, что из двух открытых предприятий i и k потребитель j выберет предприятие i. Считаем также, что отношение $i \succcurlyeq_j k$ для $i, k \in I$ означает, что либо $i \succ_j k$, либо $i = k$.

Для формальной записи задачи используем следующие переменные:

x_i — переменная, показывающая открывает или нет Лидер предприятие $i \in I$; $x_i = 1$, если открывает, и $x_i = 0$, если нет;

x_{ij} — переменная, показывающая является ли предприятие $i \in I$ наилучшим для потребителя $j \in J$ среди всех предприятий, открытых Лидером.

z_i — переменная, показывающая открывает или нет Последователь предприятие $i \in I$; $z_i = 1$, если открывает, и $z_i = 0$, если нет;

z_{ij} — переменная, показывающая является ли предприятие $i \in I$, открытое Последователем, наилучшим для потребителя $j \in J$ среди всех предприятий, открытых Лидером и Последователем.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №09-01-00059 и АВЦП Рособразования (проект 2.1.1/3235).

С использованием указанных переменных и введенных обозначений задача конкурентного размещения предприятий записывается как следующая задача двухуровневого целочисленного программирования:

$$\max_{x_i,x_{ij}}\Big\{-\sum_{i\in I} f_i x_i + \sum_{j\in J}\Big(\sum_{i\in I} p_{ij}x_{ij}\Big)\Big(1-\sum_{i\in I}\tilde{z}_{ij}\Big)\Big\}; \quad (1)$$

$$x_i + \sum_{k:\ i\succ_j k} x_{kj} \leqslant 1, \quad i\in I,\ j\in J; \quad (2)$$

$$x_i \geqslant x_{ij}, \quad i\in I, j\in J; \quad (3)$$

$$x_i, x_{ij}\in\{0,1\}, \quad i\in I, j\in J; \quad (4)$$

где $\big((\tilde{z}_i),(\tilde{z}_{ij})\big)$ — оптимальное решение задачи

$$\max_{z_i,z_{ij}}\Big\{-\sum_{i\in I} g_i z_i + \sum_{i\in I}\sum_{j\in J} p_{ij}z_{ij}\Big\}; \quad (5)$$

$$x_i + z_i + \sum_{k:\ i\succ_j k} z_{kj} \leqslant 1, \quad i\in I,\ j\in J; \quad (6)$$

$$z_i \geqslant z_{ij}, \quad i\in I,\ j\in J; \quad (7)$$

$$z_i, z_{ij}\in\{0,1\}, \quad i\in I,\ j\in J; \quad (8)$$

Эта задача, как и всякая задача двухуровневого программирования, включает задачу первого уровня (1)–(4), которую будем обозначать через L, и задачу второго уровня (5)–(8), которую будем обозначать через F. Для задачи (1)–(8) будем использовать обозначение (L,F).

Обозначим через $X=((x_i),(x_{ij}))$ допустимое решение задачи L, а через $\widetilde{Z}=((\tilde{z}_i),(\tilde{z}_{ij}))$ оптимальное решение задачи F при фиксированном допустимом решении X. Пару $(X,\widetilde{Z})$ будем называть *допустимым решением задачи* (L,F). Обозначим через $L(X,\widetilde{Z})$ значение целевой функции (1) на допустимом решении $(X,\widetilde{Z})$.

Далее будем считать, что Последователь при выборе своего наилучшего решения руководствуется правилом так называемого *некооперативного поведения*, когда из всех оптимальных решений задачи F выбирается такое, при котором значение целевой функции задачи (L,F) наименьшее.

При фиксированном допустимом решении X задачи L оптимальное решение $\bar{Z}$ задачи F будем называть *оптимальным некооперативным решением*, если для всякого оптимального решения $\widetilde{Z}$ задачи F выполняется неравенство $L(X,\bar{Z})\leqslant L(X,\widetilde{Z})$. Допустимое решение $(X,\bar{Z})$ задачи (L,F) назовем *допустимым некооперативным решением*, если $\bar{Z}$ — оптимальное некооперативное решение задачи F. Допустимое некооперативное решение $(X^*,\bar{Z}^*)$ задачи (L,F) назовем *оптимальным некооперативным решением*, если для любого допустимого некооперативного решения $(X,\bar{Z})$ задачи (L,F) выполняется неравенство $L(X^*,\bar{Z}^*)\geqslant L(X,\bar{Z})$. При этом величину $L(X^*,\bar{Z}^*)$ будем называть *оптимальным* значением целевой функции задачи (L,F).

Допустимое некооперативное решение $(X,\bar{Z})$ задачи (F,L) будем называть также *приближенным* решением задачи (L,F). Понятно, что приближенное решение $(X,\bar{Z})$ задачи (L,F) можно построить по допустимому решению X задачи L. Соответствующее оптимальное некооперативное решение $\bar{Z}$ задачи F определяется с помощью алгоритма, состоящего из двух этапов. На этапе 1 при фиксированном решении X решается задача F и вычисляется оптимальное значение ее целевой функции, а на этапе 2 с использованием этой величины определяется оптимальное некооперативное решение задачи F.

Верхняя граница для оптимального значения целевой функции задачи (L,F)

При построении верхней границы будем дополнительно предполагать, что для всякого $j\in J$ величины p_{ij}, $i\in I$, обладают *свойством невозрастания* относительно порядка $\succ_j$, т. е. для любых $i,k\in I$ таких, что $i\succ_j k$, выполняется неравенство $p_{ij}\geqslant p_{kj}$.

Для всякого $j\in J$ определим множества $I_j\subset I$, с использованием которых будет построена искомая верхняя граница. Для этого при фиксированном $j_0\in J$ сформулируем условия, позволяющие для всякого $i\in I$ выяснить $i\in I_{j_0}$ или $i\notin I_{j_0}$. Для $i\in I$ рассмотрим множества

$$N(i)=\{k\in I\colon k\succ_{j_0} i\};$$
$$J(i)=\{j\in J\colon i\succcurlyeq_j k \text{ для всякого } k\notin N(i)\}.$$

Заметим, что $J(i)\neq\varnothing$, поскольку $j_0\in J(i)$.

Если $N(i)=\varnothing$, то считаем по определению, что $i\in I_{j_0}$. Пусть $N(i)\neq\varnothing$. Для всякого $k\in N(i)$ построим множество

$$J(k,i)=\{j\in J\colon k\succ_j i\}.$$

Считаем, что $i\in I_{j_0}$, если для каждого $k\in N(i)$ выполняется неравенство

$$g_k > \sum_{j\in J(k,i)} p_{kj},$$

и $i\notin I_{j_0}$, если найдется $k\in N(i)$, для которого указанное неравенство нарушается.

Содержательный смысл множества I_j поясняет следующая лемма, устанавливающая, что если Лидер планирует получить доход от потребителя $j\in J$ и при этом не открывает ни одного предприятия из множества I_j, то потребитель j будет «захвачен» Последователем.

Лемма 1. *При любом допустимом некооперативном решении* $(X,\bar{Z})$, $X=((x_i),(x_{ij}))$, $\bar{Z}=((\bar{z}_i),(\bar{z}_{ij}))$, *для всякого* $j_0\in J$, *такого что*

$p_{i_0j_0}x_{i_0j_0} > 0$ *для некоторого* $i_0 \notin I_{j_0}$, *выполняется неравенство* $\sum\limits_{i\in I} \bar{z}_{ij_0} = 1$.

Отсюда получаем:

Лемма 2. *При любом допустимом некооперативном решении* $(X, \bar{Z})$, $X = ((x_i), (x_{ij}))$, $\bar{Z} = ((\bar{z}_i), (\bar{z}_{ij}))$, *для всякого* $j \in J$ *выполняется неравенство*

$$\Big(\sum_{i\in I} p_{ij}x_{ij}\Big)\Big(1 - \sum_{i\in I} \bar{z}_{ij}\Big) \leqslant \max_{i\in I_j} p_{ij}x_i.$$

Определим матрицу (h_{ij}), $i \in I$, $j \in J$, положив

$$h_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i \in I_j, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Теорема 3. *Величина*

$$\max_{(x_i)} \Big\{ -\sum_{i\in I} f_i x_i + \sum_{j\in J} \max_{i:\ x_i=1} p_{ij}h_{ij} \Big\}$$

является верхней границей для оптимального значения целевой функции задачи (L, F).

Из сказанного следует, что вычисление верхней границы сводится к решению классической задачи размещения предприятий на максимум вида

$$\max_{(x_i),(x_{ij})} \Big\{ -\sum_{i\in I} f_i x_i + \sum_{j\in J}\sum_{i\in I} p_{ij}h_{ij}x_{ij} \Big\};$$
$$\sum_{i\in I} x_{ij} \leqslant 1, \quad j \in J;$$
$$x_i \geqslant x_{ij}, \quad i \in I,\ j \in J;$$
$$x_i, x_{ij} \in \{0, 1\}, \quad i \in I,\ j \in J.$$

Если $X^* = ((x_i^*), (x_{ij}^*))$ — оптимальное решение этой задачи, то в силу свойства невозрастания величин p_{ij}, $i \in I$, при фиксированном $j \in J$ это решение можно считать допустимым решением задачи L, которое порождает допустимое некооперативное решение задачи (L, F), определяющее нижнюю границу для оптимального значения целевой функции задачи (L, F).

Алгоритм построения приближенного решения задачи (L, F)

Выше отмечено, что в качестве приближенного решения задачи (L, F) можно рассматривать любое допустимое решение X задачи L. Значение целевой функции задачи (L, F) на соответствующем допустимом некооперативном решении $(X, \bar{Z})$ определяется по решению X однозначно. Кроме того, само допустимое решение $X = ((x_i), (x_{ij}))$ задачи L полностью определяется (0,1)-вектором $x = (x_i)$. В силу этого задачу (L, F) можно рассматривать как задачу максимизации псевдобулевой функции $f(x)$, $x \in B^m$, значение которой на $(0, 1)$-векторе x есть значение целевой функции задачи (L, F) на соответствующем допустимом некооперативном решении.

Общепринятым подходом к отысканию приближенного решения задачи максимизации псевдобулевой функции $f(x)$ является использование процедуры локального поиска [1] по некоторой заданной окрестности $N(x) \subset B^m$. Результатом работы этой процедуры является локально-оптимальное решение x_0, т.е. такое решение, что $f(x_0) \geqslant f(x)$ для всякого $x \in N(x_0)$. При этом в качестве окрестности $N(x)$ используются следующие множества:

$$N_1(x) = \big\{y \in B^m \colon d(x, y) = 1\big\};$$
$$N_2(x) = \big\{y \in B^m \colon d(x, y) = 2,\ d(0, x) = d(0, y)\big\};$$
$$N_3(x) = N_1(x) \cup N_2(x),$$

где $d(x, y)$ — расстояние Хэмминга.

В нашем случае локальный поиск по «широкой» окрестности, например окрестности $N_3(x)$, может оказаться трудоемким, поскольку вычисление значения функции $f(x)$ является трудоемкой процедурой. Поэтому для построения локально-оптимального решения используется окрестность $N_0(x) \subset N_3(x)$ специального вида, включающая в себя m «перспективных» вариантов изменения текущего решения x.

Таким образом, для построения приближенного решения может быть использована стандартная процедура локального поиска по окрестности $N_0(x)$ с начальным решением x^*, получаемым одновременно с вычислением верхней границы. Однако такое приближенное решение x_0 является наилучшим в сравнении только с относительно небольшим числом решений — элементами множества $N_0(x)$.

В предлагаемой модификации стандартной процедуры локального поиска используется обобщенная окрестность $\widetilde{N}_0(x_0)$, определяемая для локально-оптимальных решений x_0 и включающая локально-оптимальные решения «окружающие» решение x_0.

Пусть задана окрестность $N_0(x)$ и пусть x_0 — локально-оптимальное решение относительно окрестности $N_0(x)$. Обобщенная окрестность $\widetilde{N}_0(x)$ содержит не более m элементов и включает в себя локально-оптимальные решения $\tilde{x}_0^k$, $k \in I$, которые определяются по решению x_0 следующим образом. При фиксированном $k \in I$ рассмотрим наряду с окрестностью $N_0(x)$ окрестность

$$N_0^k(x) = \big\{y \in N_0(x) \colon y_k = x_k\big\}$$

и (0,1)-вектор $y^k = (y_1^k, \ldots, y_m^k)$, отличающийся от решения $x_0 = (x_{01}, \ldots, x_{0m})$ только тем, что $y_k^k = 1 - x_{0k}$. Используя вектор y^k в качестве начальной точки, посредством процедуры локального поиска по окрестности $N_0^k(x)$ определяет-

ся решение y_0^k. Далее по этому решению посредством процедуры локального поиска по окрестности $N_0(x)$ строится локально-оптимальное решение $\tilde{x}_0^k$. В целом получаем

$$\widetilde{N}_0(x_0) = \{y \in B^m : y = \tilde{x}_0^k \text{ для некоторого } k \in I\}.$$

Отметим, что для различных $k \in I$ получаемые локально-оптимальные решения $\tilde{x}_0^k$ могут совпадать друг с другом и с исходным локально-оптимальным решением x_0. Поэтому число элементов в множестве $\widetilde{N}_0(x_0)$ может быть меньше чем m.

Алгоритм локального поиска по обобщенной окрестности $\widetilde{N}_0(x_0)$ состоит из предварительного шага и некоторого числа однотипных основных шагов.

На предварительном шаге посредством стандартной процедуры локального поиска по окрестности $N_0(x)$, начиная с решения x^*, определяется локально-оптимальное решение x_0.

На каждом основном шаге имеется текущее локально-оптимальное решение x_0. Шаг состоит в последовательном построении для всякого $k \in I$ локально-оптимального относительно окрестности $N_0(x)$ решения $\tilde{x}_0^k$ и отыскании среди элементов множества $\widetilde{N}_0(x_0)$ локально-оптимального решения лучше, чем x_0. Если найти такое решение не удается, то алгоритм заканчивает работу. В противном случае начинается следующий основной шаг.

Проведенные вычислительные эксперименты на некоторых классах задач конкурентного размещения предприятий размерности $m = 20, \ldots, 40$, $n = 20, \ldots, 40$ со случайным образом сформированными исходными данными показали, что локально-оптимальное относительно окрестности $N_0(x)$ решение x_0 существенно улучшает начальное приближенное решение x^*, получаемое в результате вычисления верхней границы, а использование обобщенной окрестности $\widetilde{N}_0(x_0)$ в подавляющем большинстве примеров позволяет получить оптимальное решение.

Выводы

Построены алгоритмы, позволяющие за приемлемое время получать верхнюю оценку значения целевой функции задачи конкурентного размещения предприятий и «хорошее» приближенное решение задачи. Предложенный способ вычисления верхней границы может быть модифицирован на случай, когда значения части переменных решения $x_i,\ i \in I$ фиксированы. Это дает возможность использовать данный подход для построения алгоритмов неявного перебора для нахождения оптимального решения задачи.

Литература

[1] *Береснев В. Л.* Дискретные задачи размещения и полиномы от булевых переменных. — Новосибирск: Изд-во Института математики, 2005. — 408 с.

[2] *Береснев В. Л.* Верхние оценки для целевых функций дискретных задач конкурентного размещения предприятий // Дискретный анализ и исследование операций. — 2008. — Т. 15, № 4. — С. 3–24.

[3] *Campos C., Moreno J.A.* Multiple voting location problems // European J. Oper. Res. — 2008. — V. 191, N 2. — Pp. 436–452.

[4] *Dempe S.* Foundations of bilevel programming. — Dordrecht: Kluwer Ac. Pub., 2002. — 332 p.

[5] *Plastria F.* Static competitive facility location: An overview of optimization approaches // Eur. J. Oper. Res. — 2001. — V. 129. — Pp. 461–470.

[6] *Plastria F., Vanhaverbeke L.* Discrete models for competitive location with foresight // Comput. Oper. Res. — 2008. — V. 35. — Pp. 683–700.

[7] *Santos-Penãte D. R., Suárez-Vega R., Dorta-Gonzáles P.* The Leader-Follower location model // Networks and Spatial Economics. — 2007. — V. 7. — Pp. 45–61.

[8] *Stackelberg H. von.* The theory of the market Economy. — Oxford: Oxford Univ. Press, 1952 — 289 p.

Алгоритмы с оценками качества решения некоторых задач выбора подмножества векторов в евклидовом пространстве*

Гимади Э. Х.
gimadi@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет

Рассматриваются некоторые дискретные экстремальные задачи, возникающие в рамках анализа данных, связанных с выбором из конечного семейства векторов в многомерном евклидовом пространстве $\mathbb{R}^k$ подмножества векторов с максимальной нормой суммы (с усреднением или без). Для решения этих задач представлены как приближенные алгоритмы с оценками точности, так и точные комбинаторные алгоритмы, полиномиально разрешимые при фиксированной размерности пространства $\mathbb{R}^k$.

Algorithms with performance bounds for some vector subset problems in Euclidean space*

Gimadi E. Kh.
Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

Discrete optimization problems that arise in data analysis are considered. The problems connect to finding a subset of vectors in multidimensional Euclidean space $\mathbb{R}^k$ with maximum norm of sum (with or without averaging). Approximation algorithms with performance bounds are presented that polynomially solvable in the case of fixed dimension of the space.

В настоящей работе представлены результаты исследования, полученные в работах [1–7], для следующих дискретных оптимизационных задач «m-подмножество векторов (далее m-ПВ), «подмножество векторов с усреднением» (далее ПВУ), «m-подмножество векторов с ограничением» (далее m-ПВО) и «подмножество векторов с усреднением и ограничением» (далее ПВУО), связанные с выбором из семейства мощности n векторов многомерного евклидова пространства $\mathbb{R}^k$ подмножества векторов с максимальной нормой суммы (с усреднением или без). Под нормой понимается евклидова норма в $\mathbb{R}^k$, т. е. $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + \ldots + x_k^2}$.

Задача m-ПВ: *Задано конечное семейство векторов $V = \{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ в $\mathbb{R}^k$ и натуральное число $m < n$. Требуется найти подсемейство векторов $U \subseteq V$ мощности m с максимальной нормой суммы $\left\|\sum_{v \in U} v\right\|$.*

Задача ПВУ: *Задано конечное семейство векторов $V = \{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ в $\mathbb{R}^k$. Требуется найти подсемейство векторов $U \subset V$, максимизирующее функцию*

$$F(U) = \sum_{v \in U} \|v\|^2 \,/\, |U|. \qquad (1)$$

Задача m-ПВО: *Задана конечная последовательность векторов $V = \{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ в $\mathbb{R}^k$ и натуральные числа m и l, удовлетворяющие условию $lm < n$. Требуется выделить в V подмножество векторов $U = \{\boldsymbol{v}_{a_1}, \boldsymbol{v}_{a_2} \ldots, \boldsymbol{v}_{a_m}\}$, обладающее максимальной нормой суммы, при соблюдении ограничений на номера соседних векторов выделенного подмножества:*

$$a_{i+1} - a_i \geqslant l \ \text{ для } i = 1, \ldots, m-1. \qquad (2)$$

Задача ПВУО получается из m-ПВО также, как ПВУ из m-ПВ.

Задача ПВУО: *Задана конечная последовательность векторов $V = \{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ в $\mathbb{R}^k$ и натуральное число l. Требуется выделить в V подмножество векторов $U = \{\boldsymbol{v}_{a_1}, \boldsymbol{v}_{a_2}, \ldots, \boldsymbol{v}_{a_m}\}$, максимизирующее функцию вида (1) с соблюдением ограничений (2).*

Эти задачи возникают при решении прикладной задачи обнаружения квазипериодически повторяющегося фрагмента в зашумленной числовой последовательности при заданном числе повторов. Подобная ситуация типична для таких приложений, как электронная разведка, радиолокация, телекоммуникация, геофизика, обработка речевых сигналов, медицинская и техническая диагностика и др. (см. [4, 5]). В общем случае эти задачи NP-трудны [1, 4–6].

Алгоритмы решения задач ПВ и ПВО с произвольными координатами векторов

В работе [2] показана NP-трудность задач и дан приближенный алгоритм решения, основан-

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (проекты № 08-01-00516, № 10-07-00195), целевой программы № 2 Президиума РАН (проект № 227), а также целевой программы СО РАН (интеграционный проект № 44).

ный на просмотре детерминированно заданного вспомогательного множества направлений (векторов) $W = (W_1, \ldots, W_L)$, $W_i \in \mathbb{R}^k$. Для каждого такого направления W_i определяется набор из m векторов в V с максимальной суммой проекций на W_i, после чего в качестве приближенного решения задачи m-ПВ принимается набор векторов, дающий наибольшую норму вектора-суммы.

Теорема 1 ([1]). *Задачи m-ПВ и m-ПВО решаются алгоритмом с гарантированной относительной погрешностью, не превышающей величины $(k-1)/(8L^2)$, где L — параметр алгоритма. Время работы алгоритма $O\bigl(nkp(2L+1)^{k-1}\bigr)$, где p равно k для задачи m-ПВ и $k+m$ для задачи m-ПВО.*

Теорема устанавливает для обеих задач построение вполне полиномиальной аппроксимационной схемы (FPTAS) для случая фиксированной размерности пространства $\mathbb{R}^k$. Действительно, при относительной погрешности $\varepsilon = (k-1)/(8L^2)$ имеем $L = \sqrt{(k-1)/(8\varepsilon)}$ и для времени решения, например, задачи m-ПВ, получим полиномиальную относительно n и $1/\varepsilon$ оценку

$$O\left(nk^2\left(\frac{k-1}{\varepsilon}\right)^{\frac{k-1}{2}}\right).$$

Из теоремы 1 следуют приведенные ниже теоремы 2 и 3.

Теорема 2 ([1]). *При фиксированной размерности k пространства $\mathbb{R}^k$ задача m-ПВ решается асимптотически точно при выборе параметра $L = L(n)$, где $L(n)$ — произвольная неограниченно растущая функция от n.*

Теорема 3 ([1]). *Если размерность k пространства $\mathbb{R}^k$ фиксирована, то задача m-ПВ с целочисленными координатами входных векторов решается точно алгоритмом с параметром $L = 0{,}5\,kmb$ за псевдополиномиальное время $O(nk^2(kmb)^{k-1})$, где b — максимальная по абсолютной величине координата векторов из семейства V.*

Вопрос о сложностном статусе задач m-ПВ и m-ПВО при фиксированной размерности k пространства $\mathbb{R}^k$ в [1] оставался открытым, хотя для задачи ПВ без ограничения на мощность выбираемого подмножества векторов ранее был уже известен точный алгоритм [2] сложности $O(k^2n^k)$, полиномиальный в случае фиксированного k.

Алгоритмы ДП для m-ПВ и m-ПВО с целочисленными координатами векторов

Для построения точных алгоритмов решения задач m-ПВ и m-ПВО с целочисленными координатами векторов весьма продуктивной оказалась техника динамического программирования [3].

Запишем задачу m-ПВ в терминах целочисленного программирования:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{k}\Bigl(\sum\limits_{j=1}^{n} v_{ij}x_j\Bigr)^2 \to \max\limits_{\substack{x_j\in\{0,1\}\\ j=1,\ldots,n}}; \\ \sum\limits_{j=1}^{n} x_j = m. \end{cases} \tag{3}$$

Здесь переменная x_j принимает значение, равное 1, если соответствующий вектор входит в выбранное множество; ограничение определяет, что выбрано ровно m векторов, а целевая функция представляет квадрат эвклидовой нормы вектора-суммы.

Пусть $\boldsymbol{B} \in \mathbb{Z}_+^{k-1}$ и $\boldsymbol{L} \in \mathbb{Z}_+^{k-1}$ — векторы с компонентами B_i и L_i, $1 \leqslant i < k$, соответственно, где B_i (L_i) — сумма m максимальных (минимальных) значений i-ой строки матрицы (v_{ij}).

Обозначим

$$\mathcal{B} = \bigl\{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{Z}_+^{k-1} \bigm| \boldsymbol{L} \leqslant \boldsymbol{\beta} \leqslant \boldsymbol{B}\bigr\};$$

$$X_m(\beta) = \left\{ (x_1,\ldots,x_n) \;\middle|\; \begin{array}{l} \sum\limits_{j=1}^{n} v_{ij}x_j = \beta_i,\ 1 \leqslant i < k \\ \sum\limits_{j=1}^{n} x_j = m \\ x_j \in \{0,1\},\ j = 1,\ldots,n \end{array} \right\}.$$

Для элементов последней k-ой строки введем обозначение $c_j = v_{kj}$.

Следующая теорема представляет задачу m-ПВ в виде задачи двухуровнего программирования.

Теорема 4. *Пусть $x^*(\boldsymbol{\beta})$ и $\widetilde{f}_{mn}(\boldsymbol{\beta})$ — соответственно, оптимальное решение и значение оптимума следующей задачи*

$$\Bigl|\sum_{j=1}^{n} c_j x_j\Bigr| \to \max_{x\in X_m(\beta)}. \tag{4}$$

Пусть $\boldsymbol{\beta}^*$ — оптимальное решение задачи

$$\sum_{i=1}^{k-1}\beta_i^2 + \widetilde{f}_{mn}^2(\boldsymbol{\beta}) \to \max_{\boldsymbol{\beta}\in\mathcal{B}}. \tag{5}$$

Тогда $x^*(\boldsymbol{\beta}^*)$ — оптимальное решение задачи (1) m-ПВ с целочисленными координатами векторов.

Задачу m-ПВ в форме (3) можно записать в эквивалентном виде

$$g(\boldsymbol{\beta}, x) = \sum_{i=1}^{k-1}\beta_i^2 + \Bigl(\sum_{j=1}^{n} c_j x_j\Bigr)^2 \to \max_{\substack{x\in X_m(\beta)\\ \boldsymbol{\beta}\in\mathcal{B}}}. \tag{6}$$

Заметим, что для нахождения оптимального решения задачи (4) достаточно решить две задачи:

$$\sum_{j=1}^{n} \widetilde{c}_j x_j \to \max_{x\in X_m(\beta)} \tag{7}$$

для $\widetilde{c}_j = c_j$ и для $\widetilde{c}_j = -c_j,\ j = 1, \ldots, n$, и сравнить значения оптимумов.

Обозначим оптимум задачи (7) с $\widetilde{c}_j = c_j$ через $f_{mn}(\boldsymbol{\beta})$, для всех $\boldsymbol{\beta} \in \mathcal{B}$ (задача с $\widetilde{c}_j = c_j$ решается аналогично, достаточно заменить c_j на $-c_j$).

Пусть $\{\langle \mu, j; \boldsymbol{\beta}\rangle \,|\, 0 \leqslant \mu \leqslant j \leqslant n;\ 0 \leqslant \boldsymbol{\beta} \leqslant \boldsymbol{B}\}$ — семейство подзадач выбора μ векторов среди $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_j$; соответствующие оптимумы обозначим через $f_{\mu,j}(\boldsymbol{\beta})$. Обозначим $(k-1)$-мерный вектор $(v_{1j}, \ldots, v_{k-1,\,j})$ через $\boldsymbol{v}_j$, $j = 1, \ldots, n$.

Алгоритм решения задачи строится с использованием рекуррентных соотношений ДП:

$$f_{\mu,j}(\boldsymbol{\beta}) = \max\bigl\{c_j + f_{\mu-1,j-1}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{v}_j),\ f_{\mu,j-1}(\boldsymbol{\beta})\bigr\}$$

для всех $\mu = 1, \ldots, m,\ j = \mu + 1, \ldots, n$.

Теорема 5. *Задача m-ПВ с целочисленными координатами векторов решается алгоритмом ДП точно за время $O\bigl(kmn\prod_{i=1}^{k-1}(B_i - L_i)\bigr)$, где скрытая в нотации константа не зависит от k.*

Поскольку $-mb \leqslant L_i \leqslant B_i \leqslant mb$, где $b = \max\limits_{i\leqslant k,\ j\leqslant n} |v_{ij}|$, то $\prod_{i=1}^{k-1}(B_i - L_i) \leqslant (2mb)^{k-1}$. Для случая неотрицательных координат можем оценить $L_i \geqslant 0$ и $\prod_{i=1}^{k-1}(B_i - L_i) \leqslant (mb)^{k-1}$. Таким образом, при фиксированном k алгоритм ДП является псевдополиномиальным с временной сложностью $O\bigl(nkm(mb)^{k-1}\bigr)$ в случае неотрицательных координат и $O\bigl(nkm(2mb)^{k-1}\bigr)$ в случае координат произвольного знака, где скрытые в нотации константы не зависят от k. По сравнению с соответствующими алгоритмами, построенными в статье [1], трудоемкость алгоритма ДП оказывается меньше при $m < (k/2)^k$, что имеет место на практике (в задачах, связанных с анализом числовых последовательностей, $k \approx 10$, $m \approx 100$ [5]). Для задачи m-ПВО временная сложность всегда меньше в k^{k-1} раз.

Комбинаторные алгоритмы и полиномиальная разрешимость задач выбора подмножеств векторов при фиксированном k

В статье [2] для задачи ПВ без ограничения на мощность выбираемого подмножества векторов был получен точный алгоритм сложности $O(k^2 n^k)$, полиномиальный в случае фиксированного k.

Заметим, что при $k = 1$ задача m-ПВ становится тривиальной: достаточно найти сумму m максимальных и m минимальных чисел и сравнить их модули. При $k > 1$, если известно направление, вдоль которого направлен оптимальный вектор, она сводится к одномерной — достаточно найти множества векторов, дающих m максимальных и m минимальных проекций на это направление.

Таким образом, приходим к следующей декомпозиции задачи m-ПВ [7].

Теорема 6. *Пусть S^k — единичная сфера в пространстве $\mathbb{R}^k$. Для произвольного единичного вектора $\boldsymbol{\alpha}$ обозначим через $x^*(\boldsymbol{\alpha})$ и $f(\boldsymbol{\alpha})$ — оптимальное решение и значение оптимума задачи*

$$\begin{cases} \sum\limits_{j=1}^{n} (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{v}_j) x_j \to \max\limits_{\substack{x_j \in \{0,1\} \\ j=1,\ldots,n}}; \\ \sum\limits_{j=1}^{n} x_j = m. \end{cases} \tag{8}$$

Пусть $\boldsymbol{\alpha}^*$ — оптимальное решение задачи

$$f(\boldsymbol{\alpha}) \to \max_{\boldsymbol{\alpha} \in S^k}. \tag{9}$$

Тогда $x^*(\boldsymbol{\alpha}^*)$ — оптимальное решение задачи m-ПВ.

Задача нижнего уровня (8) может быть решена за линейное время $O(n)$ (см. [8]).

Примечательно, что для решения задачи верхнего уровня достаточно решить задачу нижнего уровня для конечного, полиномиального по n при фиксированном k, числа направлений $\boldsymbol{\alpha}$.

Аналогично определению из статьи [2] назовем *семейством областей принадлежности решения (ОПР)* для множества векторов S множество максимальных по включению связных подмножеств пространства $\mathbb{R}^k$, не пересекающихся с гиперплоскостями, ортогональными векторам из семейства S. Другими словами, это множество открытых областей, на которые гиперплоскости разбивают пространство $\mathbb{R}^k$. Для задачи ПВ будем рассматривать множество $S = \{\boldsymbol{v}_p - \boldsymbol{v}_q \,|\, 1 \leqslant p < q \leqslant n\}$ попарных разностей векторов из заданного множества. Очевидно, что любая ОПР лежит с одной стороны от каждой из гиперплоскостей, т. е. внутри ОПР сохраняется знак скалярного произведения на любой вектор $\boldsymbol{v}_p - \boldsymbol{v}_q$. *Семейством представителей ОПР* назовем множество векторов, содержащее ровно по одному вектору из каждой области семейства ОПР.

Теорема 7. *Пусть $\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma} \in \Omega$, где Ω — одна из областей семейства ОПР. Тогда задача (8) имеет единственное решение для параметров $\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}$, причем $x^*(\boldsymbol{\beta}) = x^*(\boldsymbol{\gamma})$. Это решение является оптимальным и для любого вектора $\boldsymbol{\alpha} \in \bar{\Omega} \setminus \Omega$, принадлежащего границе области Ω.*

Из этой теоремы следует, что оптимальное решение задачи (9) содержится среди оптимальных решений задачи (8), где в качестве параметра $\boldsymbol{\alpha}$ взяты все вектора из семейства представителей ОПР. Таким образом, для решения задачи ПВ достаточно найти семейство представителей ОПР и решить задачу (8) для каждого из этих векторов.

Теорема 8 ([2]). *Семейство представителей ОПР для множества векторов S мощности $|S| = N$ в пространстве $\mathbb{R}^k$ имеет мощность $O(kN^{k-1})$ и может быть найдено за время $O(k^2 N^k)$.*

Опишем алгоритм для решения задачи m-ПВ с произвольными координатами векторов.

Этап 1. С помощью алгоритма из [2] построить семейство представителей ОПР задачи ПВ.

Этап 2. Для каждого представителя решить задачу (8) за время $O(n)$.

Этап 3. Выбрать из найденных решений то, для которого норма соответствующего вектора-суммы максимальна. Полученное решение является оптимальным для задачи m-ПВ.

Из описания алгоритма с учетом теоремы 9 следует

Теорема 9. *Задача m-ПВ с произвольными координатами векторов решается точно за время $O(k^2n^{2k})$.*

Поскольку в задаче ПВУ мощность выбираемого подмножества заранее не известна, то используя алгоритм для решения задач m-ПВ для различных m, можно было бы решить задачу ПВУ за время, в n раз большее. Однако специфика задачи позволяет сделать это за то же время, что и для задачи ПВ с заданным числом подмножеств, т. е. за время $O(k^2n^{2k})$.

Следствие 1. *При фиксированной размерности пространства $\mathbb{R}^k$ имеет место полиномиальная разрешимость задач m-ПВ и ПВУ.*

Следствие 2. *Для задачи m-ПВ с целочисленными координатами векторов алгоритмы, использующие технику ДП, остаются предпочтительнее комбинаторного алгоритма в случае, когда $b = o(n^2/m)$.*

Рандомизированный алгоритм

В отличие от работы [2] можно предложить более простой в реализации алгоритм A' с использованием рандомизированного семейства векторов $W = (W_i)$, $i = 1, \ldots, L$, когда очередной вектор W_i определяется лучом из начала координат в произвольно выбранную точку на поверхности единичной сферы k-мерного шара в $\mathbb{R}^k$. Далее, как и в случае детерминированного семейства направлений W, алгоритм находит m-набор векторов из V с максимальной суммой проекций на W_i. В качестве решения задачи m-ПВ полагается m-набор векторов из V с наибольшей нормой суммы.

Утверждение 10. *При фиксированной размерности k пространства $\mathbb{R}^k$ посредством рандомизированного алгоритма A' с временной сложностью $O(n \ln^{k-1} n)$ может быть получено асимптотически точное решение задачи m-ПВ с оценками относительной погрешности $\varepsilon_{A'} = 0{,}5/\ln^2 n$ и вероятности несрабатывания $\delta_{A'} = 1/n$.*

Аналогичный подход применим и к задаче ПВУ, в которой требуется максимизировать функцию

$$F(U) = \Big\| \sum_{v \in U} v \Big\|^2 \Big/ |U|.$$

Литература

[1] *Бабурин А. Е., Гимади Э. Х., Глебов Н. И., Пяткин А. В.* Задача отыскания подмножества векторов с максимальным суммарным весом // Дискрет. анализ и исслед. операций, Серия 2. — 2007. — Т. 14, №. 1. — С. 22–32.

[2] *Бабурин А. Е., Пяткин А. В.* О полиномиальных алгоритмах решения одной задачи суммирования векторов // Дискрет. анализ и исслед. операций, Серия 1. — 2006. — Т. 13, № 2. — С. 3–10.

[3] *Гимади Э. Х., Глазков Ю. В., Рыков И. А.* О двух задачах выбора подмножества векторов с целочисленными координатами в евклидовом пространстве с максимальной нормой суммы размерности // Дискрет. анализ и исслед. операций. — 2008. — Т. 15, № 5. — С. 30–43.

[4] *Гимади Э. Х., Кельманов А. В., Кельманова М. А., Хамидуллин С. А.* Апостериорное обнаружение в числовой последовательности квазипериодически повторяющегося фрагмента при заданном числе повторов // Сиб. журн. индустриальной математики. — 2006. — Т. IX, № 1(25). — С. 55–74.

[5] *Кельманов А. В., Хамидуллин С. А., Окольнишникова Л. В.* Апостериорное обнаружение одинаковых подпоследовательностей-фрагментов в квазипериодической последовательности // Сиб. журн. индустриальной математики. — 2002. — Т. 5, № 2(10). — С. 94–108.

[6] *Кельманов А. В., Пяткин А. В.* Об одном варианте задачи выбора подмножества векторов // Дискрет. анализ и исслед. операций. — 2008. — Т. 15, № 5. — С. 25–40.

[7] *Гимади Э. Х., Пяткин А. В., Рыков И. А.* О полиномиальной разрешимости некоторых задач выбора подмножества векторов в евклидовом пространстве фиксированной размерности // Дискретный анализ и исследование операций. — 2008. — Т. 15, № 6. — С. 11–19.

[8] *Ахо А., Хопкрофт Дж., Ульман Дж.* Построение и анализ вычислительных алгоритмов. — Москва: Мир, 1979.

Параллельные методы решения задач оптимизации большой размерности*

Голиков А. И.[1]***, Евтушенко Ю. Г.***[1]***, Посыпкин М. А.***[2]
evt@ccas.ru
Москва, [1]Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН, [2]Институт системного анализа РАН

Рассмотрены метод неравномерных покрытий и обобщенный метод Ньютона для решения различных задач оптимизации. Показана возможность эффективно решать задачи большой размерности на многопроцессорных вычислительных комплексах.

Parallel methods for solving large-scale optimization problems*

Golikov A. I.[1]***, Evtushenko Y. G.***[1]***, Posypkin M. A.***[2]
[1]Dorodnicyn Computing Centre of RAS, [2]Insistute for Systems Analysis RAS, Moscow, Russia

Non-uniform coverage method and generalized Newton method for solving various optimization problems are considered. Parallel implementation of these methods for solving large scale-scale problems is discussed.

Понятие большой размерности задачи оптимизации зависит от вида решаемой задачи и характеристик применяемой вычислительной техники. Характерное число переменных в задачах глобальной оптимизации измеряется десятками-сотнями. В задачах линейного программирования число переменных может достигать десятков миллионов. Рассматриваются методы, хорошо поддающиеся распараллеливанию: метод неравномерных покрытий и обобщенный метод Ньютона.

Теоретические основы метода неравномерных покрытий

Для непрерывной функции $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ставится задача отыскания глобального минимума на *допустимом компактном множестве* $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Формально задача записывается следующим образом:

$$f_* = \operatorname{glob}\min_{x\in X} f(x) = f(x_*), \tag{1}$$

где x_* — точка, в которой достигается глобальный минимум, равный f_*.

Определим множество *решений* X_* этой задачи и множество *ε-оптимальных решений* X_*^ε:

$$X_* = \{x \in X\colon f(x) = f_*\};$$
$$X_*^\varepsilon = \{x \in X\colon f(x) \leqslant f_* + \varepsilon\},\ \varepsilon \in \mathbb{R}_+.$$

Пусть задан набор из i допустимых точек $N_i = \{x_1, \ldots, x_i\}$. Определим текущий *рекорд* u_i и соответствующую *рекордную точку* x_r по формулам:

$$u_i = \min_{j=1,\ldots,i} f(x_j) = f(x_r). \tag{2}$$

Индекс r принимает значения $r = 1, \ldots, i$, и в общем случае определяется неоднозначно. Из (2) следует, что последовательность текущих рекордов такова, что

$$u_1 \geqslant \ldots \geqslant u_i \geqslant f_*.$$

Для функции $f(x)\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, множества $Z \subseteq \mathbb{R}^n$ и числа $\lambda \in \mathbb{R}$ определим понятие Лебеговского множества $S\big(Z, f(x), \lambda\big) = \{x \in Z\colon f(x) \geqslant \lambda\}$.

С каждой точкой x_i свяжем некоторую ее окрестность X_i, таким образом $x_i \in X_i$. На каждом множестве X_i определим миноранту $\mu_i(x)$, такую что $f(x) \geqslant \mu_i(x)$ для всех $x \in X_i$. Пусть множество S_i удовлетворяет условию

$$S_i \subseteq S\big(X_i, \mu_i(x), u_i - \varepsilon\big). \tag{3}$$

Будем говорить, что совокупность множеств $\{S_i\}$, $i = 1, \ldots, k$, *образует покрытие множества* X, если

$$X \subseteq \bigcup_{i=1}^{k} S_i. \tag{4}$$

Теорема 1. *Пусть набор допустимых точек N_k удовлетворяет условию (4), тогда для величины глобального минимума функции $f(x)$ на множестве X имеет место оценка*

$$u_k \geqslant f_* \geqslant u_k - \varepsilon,$$

и любая точка $x_r \in N_k$, такая что $f(x_r) = u_k$, является ε-оптимальным решением задачи (1).

Теорема 1 является теоретической базой для реализации различных вычислительных схем метода неравномерных покрытий [1, 2], в основе которых лежит построение последовательностей точек $\{x_i\}$ и соответствующих лебеговских множеств таким образом, чтобы обеспечить выполнение условия (4), называемого *условием покрытия множества* X. При этом множество X может иметь произвольную мощность и структуру.

Задача многокритериальной минимизации записывается в виде:

$$\min_{x\in X} F(x). \tag{5}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-01-12098-офи_м, поддержке ведущих научных школ НШ-4096.2010.1 и программе Президиума РАН П-14.

Здесь вектор-функция $F(x)\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ определяет векторный критерий, его компоненты $f^1(x), \ldots, f^m(x)$ составляют набор из m скалярных непрерывных критериев. Образ $\Omega = F(X)$ допустимого множества X при отображении F назовем *множеством достижимых критериев*.

Для произвольной точки $\theta \in \mathbb{R}^m$ определим *юго-западное* $\mathrm{SW}(\theta)$ и *северо-восточное* $\mathrm{NE}(\theta)$ множества следующим образом:

$$\mathrm{SW}(\theta) = \{y \in \mathbb{R}^m\colon y \leqslant \theta\},\ \mathrm{NE}(\theta) = \{y \in \mathbb{R}^m\colon y \geqslant \theta\}.$$

Расширим эти определения на случай произвольного множества $\Theta \subseteq \mathbb{R}^m$:

$$\mathrm{SW}(\Theta) = \bigcup_{\theta\in\Theta} \mathrm{SW}(\theta), \quad \mathrm{NE}(\Theta) = \bigcup_{\theta\in\Theta} \mathrm{NE}(\theta).$$

Для множества $\Theta \subseteq \mathbb{R}^m$ определим его *Парето-оптимальное подмножество* $\mathcal{P}(\Theta)$ следующим образом: $\mathcal{P}(\Theta) = \{\theta \in \Theta\colon \Theta \cap \mathrm{SW}(\theta) = \theta\}$.

Результат $\Omega_* = \mathcal{P}(\Omega)$ применения введенного оператора $\mathcal{P}$ к множеству достижимых критериев Ω назовем *множеством Парето* для задачи (5). Пусть $A_* \subseteq X$ — прообраз множества Ω_* при отображении F, т. е. $\Omega_* = F(A_*)$. Решение задачи (5) состоит в нахождении множеств A_* и Ω_*.

Пусть задан набор допустимых точек $N_i = \{x_1, \ldots, x_i\} \subseteq X$. Ему соответствует множество образов $F(N_i) = \{F(x_1), \ldots, F(x_i)\}$. Из этого подмножества выделим парето-оптимальное подмножество $\Omega_i = \mathcal{P}\big(F(N_i)\big)$. Оператор $\mathcal{P}$ легко алгоритмически реализуется.

Будем говорить, что множество Ω_*^ε является ε-Парето множеством, если для каждого $\omega \in \Omega_*$ найдется точка $\omega' \in \Omega_*^\varepsilon$, такая что $\omega \in \mathrm{NE}(\omega' - \varepsilon)$. Также потребуем, чтобы в множестве Ω_*^ε не было двух таких различных точек ω_1, ω_2, что $\omega_1 \leqslant \omega_2$. Пусть A_*^ε — прообраз множества Ω_*^ε при отображении $F(x)$, т. е. $\Omega_*^\varepsilon = F(A_*^\varepsilon)$. Приближенное решение задачи (5) состоит в нахождении множеств A_*^ε и Ω_*^ε.

С каждой точкой x_i свяжем некоторую ее окрестность X_i, таким образом, $x_i \in X_i$. На каждом множестве X_i определим миноранту $\mu_i(x)\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, такую, что $F(x) \geqslant \mu_i(x)$ для всех $x \in X_i$. Элемент покрытия — множество S_i, определяемый в однокритериальном случае соотношением (3), в случае многокритериальной оптимизации должен удовлетворять условию:

$$S_i \subseteq \big\{x \in X\colon \mu_i(x) \in \mathrm{NE}(U_i - \varepsilon)\big\}.$$

Справедливо следующее утверждение, обобщающее теорему 1 на случай многокритериальной оптимизации.

Теорема 2. *Пусть набор допустимых точек $N_k = \{x_1, \ldots, x_k\}$ таков, что выполнено условие покрытия $X \subseteq \bigcup_{i=1}^k S_i$, тогда множество Ω_k является ε-Парето множеством задачи (5).*

Программная реализация метода неравномерных покрытий

Рассмотрим обобщение одной из возможных схем реализации метода неравномерных покрытий для задач с одним критерием — алгоритма бисекций [2]. Предполагается, что существует n-мерный параллелепипед P, с гранями, параллельными координатным плоскостям, содержащий допустимое множество X.

Обобщенный алгоритм бисекций: $\mathcal{L}$ — список покрываемых параллелепипедов;

1. На первом шаге поместить в список $\mathcal{L}$ параллелепипед P: $\mathcal{L} = \{P\}$.
2. Выбрать параллелепипед $P_i \in \mathcal{L}$.
3. Выбрать точку $x_i \in P_i \cap X$ и при выполнении условия $f(x_i) < u_{i-1}$ изменить текущий рекорд u_i и рекордную точку x_i по формуле (2).
4. Используя миноранты, определить подмножества, заведомо не содержащие допустимых точек из $P_i \cap X$, либо точек, в которых может быть улучшен текущий рекорд более чем на ε.
5. Если совокупность полученных подмножества покрывает параллелепипед P_i, то выполнить переход к шагу 2. В противном случае произвести сокращение и разбиение (с использованием найденных множеств) параллелепипеда P_i на несколько новых параллелепипедов, которые добавить к списку $\mathcal{L}$.
6. Если список пуст, то перейти к шагу 7, в противном случае перейти к шагу 2.
7. Если на шаге 3 не было найдено ни одной допустимой точки, то ограничения задачи несовместны. В противном случае рекордная точка будет ε-оптимальными решением задачи.

Обобщенный алгоритм бисекций может быть легко обобщен на случай многокритериальных задач.

Метод бисекций эффективно распараллеливается. На многопроцессорных системах с общей памятью несколько потоков независимо выполняют итерации 1–6 алгоритма, обращаясь к общему списку $\mathcal{L}$. Для предотвращения потерь, связанных с частой синхронизацией при доступе к общему списку, каждый поток также поддерживает локальный список подмножеств. Часть подмножеств из этого списка периодически копируется в общий. В момент, когда локальный список исчерпывается поток берет новое подмножество для обработки из общего списка. Реализация для систем с распределенной памятью следует той же самой схеме, но вместо копирования применяется передача сообщений по сети. Ключевым для управления процессом вычислений является выбор параметров, определяющих частоту обменов и число передаваемых данных.

Для уменьшения числа итераций применяются эвристические алгоритмы или методы локаль-

ного поиска, позволяющие быстро находить рекордное значение, близкое к оптимальному. Тем самым усиливается отсев подмножеств, заведомо не содержащих оптимальных решений. Вычислительные ресурсы распределяются между процессами, выполняющими приведенную выше общую схему алгоритма, и процессами, выполняющими эвристики. Важнейшим фактором, влияющим на производительность, является соотношение количества процессоров, реализующих эти два подхода. Более подробно параллельная реализация рассмотрена в работе [3].

Метод решения задач линейного программирования большой размерности

Традиционные методы линейного программирования (ЛП) в ряде случаев теряют свою эффективность при решении задач большой размерности (задачи с десятками миллионов неизвестных и с сотнями тысяч ограничений). Возникает необходимость создания новых численных методов, которые в полной мере используют возможности современных многопроцессорных вычислительных комплексов. Ниже приводятся алгоритмы, позволяющие не только распараллелить процесс расчетов и тем самым ускорить вычисления, но и решать задачи значительно большей размерности. Предложенные алгоритмы реализованы на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью, их эффективность подтверждена вычислительными экспериментам и решением ряда практических задач.

Пусть прямая и двойственная задачи ЛП заданы в стандартной форме

$$f_* = \min_{x\in X} c^{\intercal}x,\ X = \{x \in \mathbb{R}^n\colon Ax = b,\ x \geqslant 0_n\};\ \ (P)$$

$$f_* = \max_{u\in U} b^{\intercal}u,\ U = \{u \in \mathbb{R}^m\colon\ A^{\intercal}u \leqslant c\}. \qquad (D)$$

Здесь $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $c \in \mathbb{R}^n$ и $b \in \mathbb{R}^m$ заданы, x — вектор прямых переменных, а u — двойственных, через 0_i обозначен i-мерный нулевой вектор. Всюду ниже предполагаем, что множество решений X^* прямой задачи (P) непусто, тогда множество решений U^* двойственной задачи (D) также непусто.

Для нахождения проекции заданной точки $\hat{x}$ на множество решений прямой задачи (P) введем вспомогательную задачу безусловной максимизации

$$\max_{p\in\mathbb{R}^m} S(p, \beta, \hat{x}), \qquad (6)$$

$$S(p, \beta, \hat{x}) = \Big\{b^{\intercal}p - \frac{1}{2}\big\|(\hat{x} + A^{\intercal}p - \beta c)_+\big\|^2\Big\},$$

где скаляр β фиксирован, a_+ — вектор, у которого i-я компонента совпадает с i-й компонентой вектора a, если она неотрицательна, и равна нулю в противном случае.

Воспользуемся следующими ранее сформулированными в [4] теоремами.

Теорема 3. *Существует такое число β_*, что при любом $\beta \geqslant \beta_*$ пара $[p(\beta), \beta]$, где $p(\beta)$ — решение задачи безусловной максимизации (6), определяет проекцию $\hat{x}^*$ точки $\hat{x}$ на множество решений X^* прямой задачи (P) по формуле*

$$\hat{x}^* = \big(\hat{x} + A^{\intercal}p(\beta) - \beta c\big)_+.$$

Теорема 4. *При $\hat{x} = x^* \in X^*$ и при любом $\beta > 0$ точное решение двойственной задачи (D) находится по формуле $u^* = p(\beta)/\beta$, где $p(\beta)$ — решение задачи безусловной максимизации (6).*

Итак, в результате решения двух задач безусловной максимизации вогнутой кусочно-квадратичной функции от m переменных получается проекция точки на множество прямой задачи (P) и некоторое решение двойственной задачи (D).

Следующий итерационный процесс дает одновременное решение прямой и двойственной задач ЛП

$$p_{s+1} \in \arg\max_{p\in\mathbb{R}^m}\Big\{b^{\intercal}p - \tfrac{1}{2}\big\|(x_s + A^{\intercal}p - \beta c)_+\big\|^2\Big\};\ (7)$$

$$x_{s+1} = (x_s + A^{\intercal}p_{s+1} - \beta c)_+. \qquad (8)$$

Здесь произвольный параметр $\beta > 0$ фиксирован.

Теорема 5. *При любом $\beta > 0$ и для любой начальной точки x_0 итерационный процесс (7), (8) сходится к $x^* \in X^*$ за конечное число шагов ω. Формула $u^* = p_{\omega+1}/\beta$ определяет точное решение двойственной задачи (D).*

Решение задач безусловной максимизации (6) или (7) может выполняться любым методом, например, методом сопряженного градиента. Однако гораздо эффективней использовать обобщенный метод Ньютона. Доказательство конечной глобальной сходимости обобщенного метода Ньютона для безусловной оптимизации кусочно-квадратичной функции с выбором шага по правилу Армихо предложено О. Мангасарьяном. Рассмотрим параллельные реализации метода (7), (8) в вычислительной системе с распределенной памятью. Считаем, что у каждого процесса (исполняемой программы) имеется свое адресное пространство, а обмены данными между процессами осуществляются при помощи библиотеки MPI, каждый процесс выполняется на своем процессоре (ядре).

Расчетные формулы.

1. Задать $\beta > 0$, пороги точности tol_1 и tol для внешних и внутренних итераций соответственно, начальные приближения x_0 и p_0.

2. Вычислить значение функции $S(p_k, \beta, x_s)$ и ее градиент:

$$G_k = \frac{\partial S}{\partial p}(p_k, \beta, x_s) = b - A(x_s + A^{\intercal}p_k - \beta c)_+.$$

Здесь k — номер внутренней итерации метода Ньютона для решения задачи безусловной максимизации (7), а s — номер внешней итерации.

3. Используя обобщенную матрицу Гессе функции $S(p_k, \beta, x_s)$, сформировать матрицу $H_k \in \mathbb{R}^{m\times m}$:

$$H_k = \delta I + AD_kA^{\intercal}, \tag{9}$$

где δ — некоторое положительное число (обычно 10^{-4}), I — единичная матрица, диагональная матрица $D_k \in \mathbb{R}^{n\times n}$ задается равенствами

$$(D_k)_{ii} = \begin{cases} 1, & \text{если} \quad (x_s + A^{\intercal}p_k - \beta c)^i > 0; \\ 0, & \text{если} \quad (x_s + A^{\intercal}p_k - \beta c)^i \leqslant 0. \end{cases}$$

4. Найти направление максимизации Δp из решения линейной системы

$$H_k\Delta p = -G_k \tag{10}$$

с помощью предобусловленного метода сопряженных градиентов. В качестве предобусловливателя используется диагональная часть матрицы H_k.

5. Определить p_{k+1} по формуле $p_{k+1} = p_k - \tau_k\Delta p$, где итерационный параметр τ_k находится из решения одномерной задачи максимизации $\tau_k = \max\limits_{\tau} S(p_k - \tau\Delta p, \beta, x_s)$ методом Армихо.

6. Если выполнен критерий останова для внутренних итераций $\|p_{k+1} - p_k\| \leqslant \mathrm{tol}$, то положить $\tilde{p} = p_{k+1}$ и вычислить x_{s+1} по формуле

$$x_{s+1} = (x_s + A^{\intercal}\tilde{p} - \beta c)_+.$$

Иначе перейти к шагу 2, положив $k = k + 1$.

7. Если выполнен критерий останова для внешних итераций $\|x_{s+1} - x_s\| \leqslant \mathrm{tol}_1$, то вычислить решение двойственной задачи (D) $u^* = \frac{\tilde{p}}{\beta}$ и решение прямой задачи (P) есть $x^* = x_{s+1}$. Иначе положить $p_0 = \tilde{p}$ и перейти к шагу 2, положив $s = s + 1$.

В приведенном алгоритме наиболее трудоемкими операциями являются формирование системы (10) и ее решение. При реализации алгоритма распараллеливаются следующие операций:

1) матрично-векторные умножения: Ax и $A^{\intercal}p$;
2) вычисление скалярных произведений вида $x^{\intercal}y$, $x, y \in \mathbb{R}^n$ и $p^{\intercal}q$, $p, q \in \mathbb{R}^m$;
3) формирование обобщенной матрицы Гессе и матрицы H_k (9);
4) умножение матрицы H_k на вектор;

Все остальные вычисления являются локальными. Было реализовано несколько параллельных схем приведенного алгоритма в зависимости от вида разбиения исходной матрицы A на блоки: клеточная схема, когда матрица A разбивается на одинаковые блоки, количество которых равно числу процессоров; столбцовая схема — матрица A разбивается на блоки по столбцам; строчная схема — матрица A разбивается на блоки по строкам. Каждая из предложенных схем имеет свои достоинства и недостатки, чем и определяется область их применения. Так, столбцовая схема весьма эффективна при формировании системы линейных уравнений (10), строчная схема более эффективна для параллельного метода решения системы линейных уравнений. Была еще реализована «безматричная» схема, которая позволила решать задачи ЛП с наибольшим числом ограничений m по сравнению с другими схемами. Эта схема наиболее рационально использует память кластера, поэтому ее целесообразно применять при больших значениях m и n. Ускорение для этой схемы при сравнительно малых m может оказаться меньше единицы.

Для численных экспериментов использовался генератор случайных тестовых задач ЛП [4]. Расчеты проводились на параллельном вычислительном кластере МВС-6000IM, состоящем из двухпроцессорных узлов на основе Intel Itanium 2 с частотой 1,6 GHz, соединенными сетью Myrinet 2000 [5].

При решении задач ЛП с одним миллионом неизвестных и при десяти тысячах ограничений с помощью клеточной схемы на 144 процессорах было достигнуто ускорение расчетов примерно в 50 раз, время счета составило 28 с. Задача ЛП с двумя миллионами переменных при двухстах тысячах ограничений на 80 процессорах была решена с помощью «безматричной» схемы менее, чем за 40 минут. С помощью столбцовой схемы разбиения задача ЛП с максимальным количеством переменных — 60 млн. при четырех тысячах ограничений была решена на 128 процессорах за 140 с.

Литература

[1] *Евтушенко Ю. Г.* Численный метод поиска глобального экстремума функций (перебор на неравномерной сетке) // ЖВМ и МФ. — 1971. — Т. 11., № 6. — С. 1390–1403.

[2] *Евтушенко Ю. Г., Ратькин В. А.* Метод половинных делений для глобальной оптимизации функции многих переменных // Техническая кибернетика. — 1987. — № 1. — С. 119–127.

[3] *Evtushenko Y., Posypkin M., Sigal I.* A framework for parallel large-scale global optimization // Computer Science — Research and Development. — 2009. — V. 23, N. 3. — Pp. 211–215.

[4] *Голиков А. И., Евтушенко Ю. Г.* Метод решения задач линейного программирования большой размерности // Докл. Академии наук. — 2004. — Т. 397, № 6. — С. 727–732.

[5] *Гаранжа В. А., Голиков А. И., Евтушенко Ю. Г., Нгуен М. Х.* Параллельная реализация метода Ньютона для решения больших задач линейного программирования // Ж. вычислит. матем. и математ. физ. — 2009. — Т. 49, № 8. — С. 1369–1384.

О сложности одной задачи кластерного анализа*

Долгушев А. В., Кельманов А. В.
dolgushev@math.nsc.ru, kelm@math.nsc.ru
Новосибирск, Новосибирский государственный университет, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН

Установлена NP-полнота задачи MSSC — кластеризации (разбиения) множества векторов евклидова пространства по критерию минимума суммы квадратов — для случая, когда размерность пространства является, а число кластеров не является частью входа задачи.

On a problem of minimum-sum-of-squares clustering*

Dolgushev A. V., Kel'manov A. V.
Novosibirsk State University, Sobolev Institute of Mathmatics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

The problem of clustering a set of Euclidian vectors under the minimum-sum-of-squares criterion is proved to be NP-complete, when the dimensionality is the part of input and the number of clusters is not.

Объект исследования настоящей работы — проблемы оптимизации в задачах анализа данных и распознавания образов. Предмет исследования — задача кластеризации (разбиения) множества векторов евклидова пространства по критерию минимума суммы квадратов. Цель работы — анализ алгоритмической сложности этой задачи в случае, когда размерность пространства и число кластеров соответственно является и не является частью входа задачи.

Задача разбиения множества векторов евклидова пространства на подмножества (кластеры) по критерию минимума суммы квадратов расстояний от элементов кластеров до их центров (центр кластера определяется как сумма векторов из кластера, деленная на его мощность) известна в литературе как задача MSSC (от английского Minimum-Sum-of-Squares Clustering). Эта же задача в некоторых публикациях фигурирует под названием k-means (k средних), которое соответствует названию одного из ранних алгоритмов [7], предложенных для её решения. К задаче MSSC сводится ряд типичных проблем анализа данных, возникающих в широком спектре приложений (см., например, [2, 4, 6–8] и цитированные там работы). Суть этих проблем состоит в том, чтобы по имеющейся совокупности, включающей несколько результатов измерения набора (вектора) каких-либо характеристик для элементов из некоторого множества материальных объектов, найти подмножества наборов, соответствующих каждому из этих объектов, или найти подмножества «похожих» объектов.

Анализ сложности

В форме верификации свойств задача кластеризации формулируется следующим образом.

Задача J-MSSC

Дано: множество $V = \{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_N\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$ и положительное число K.

Вопрос: существует ли такое рабиение множества V на непустые непересекающиеся подмножества (кластеры) $C_1, \ldots, C_J$, что имеет место неравенство

$$\sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{v} \in C_j} \|\boldsymbol{v} - \bar{\boldsymbol{v}}(C_j)\|^2 \leqslant K, \qquad (1)$$

где $\bar{\boldsymbol{v}}(C_j) = \frac{1}{|C_j|} \sum\limits_{v \in C_j} \boldsymbol{v},\ j = 1, \ldots, J$, — центры кластеров?

Напомним известные факты об алгоритмической сложности задачи MSSC. Одномерный вариант задачи разрешим за полиномиальное время [9]. Четыре возможных случая многомерного варианта этой задачи индуцируются комбинированием размерности пространства и числа кластеров как элементов, которые либо являются, либо не являются частью входа задачи. Относительно этих случаев известно следующее.

Если размерность пространства и число кластеров не являются частью входа, то задача решается точно за полиномиальное время [6]. Оставшиеся три случая на протяжении многих лет бездоказательно считались NP-трудными.

В [4] представлено доказательство труднорешаемости задачи MSSC для случая, когда размерность пространства является частью входа. Однако это доказательство оказалось ошибочным [2]. Корректное доказательство было опубликовано в [3] для подслучая, когда число кластеров фиксировано и равно двум. При доказательстве установлена полиномиальная сводимость NP-трудной задачи о максимально плотном разрезе графа к рассматриваемому подслучаю задачи MSSC [3]. Из неё следует NP-трудность задачи MSSC для случая, когда размерность пространства и число кластеров являются частью входа, так как задача с двумя класте-

Работа поддержана грантами РФФИ №09-01-00032 и №10-07-00195, грантом АВЦП Рособразования № 2.1.1/3235, грантом Президиума РАН № 227, а также интеграционным грантом СО РАН № 44.

рами является частным случаем задачи с числом кластеров не меньше двух.

Далее в [8] установлена NP-трудность задачи MSSC в подслучае, когда число кластеров является частью входа, а размерность пространства фиксирована и равна двум. При доказательстве показана полиномиальная сводимость известной [5] NP-полной задачи 3-SAT к анализируемому подслучаю задачи MSSC. Из этого результата так же, как и из результата, полученного в [3], следует NP-трудность задачи MSSC в случае, когда число кластеров и размерность пространства являются частью входа, так как двумерная задача MSSC есть частный случай задачи MSSC большей размерности.

Наконец, нетрудно установить, что, когда число кластеров является частью входа, q-мерная задача MSSC полиномиально сводится к частному случаю $(q+1)$-мерной задачи путём введения нулевой $(q+1)$-й компоненты. Поэтому из результата, полученного в [8] для фиксированного q=2, следует NP-трудность задачи MSSC в случае, когда число кластеров является, а размерность пространства не является частью входа задачи.

Ниже проанализирован последний из неизученных ранее случаев задачи. При анализе сложности применяется методика, сходная с методикой, использованной в [1].

Теорема 1. *Задача MSSC* NP*-полна в случае, когда размерность пространства является, а число кластеров не является частью входа задачи соответственно.*

Идея доказательства состоит в следующем. Пусть число кластеров J не является частью входа задачи. Покажем, что для любого $J \geqslant 2$ задача J-MSSC полиномиально сводится к частному случаю задачи $(J+1)$-MSSC. Тогда результат будет следовать из NP-полноты [3] задачи 2-MSSC.

По произвольной индивидуальной задаче J-MSSC построим следующую индивидуальную задачу $(J+1)$-MSSC. Положим

$$a = \max_{i=1,\dots,N} \max_{j=1,\dots,q} |\boldsymbol{v}_i^j|,$$

где v_i^j — j-я компонента вектора $\boldsymbol{v}_i = (\boldsymbol{v}_i^1, \dots, \boldsymbol{v}_i^q) \in \in V$. Без ограничения общности будем считать, что $a \neq 0$. Далее, в задаче $(J+1)$-MSSC положим $\widetilde{K} = K$ и $\widetilde{V} = V \cup \{\boldsymbol{x}\}$, где

$$\boldsymbol{x} = (2a + K + 1, \dots, 2a + K + 1) \in \mathbb{R}^q.$$

Покажем, что для того, чтобы в задаче J-MSSC существовало разбиение множества V на кластеры $C_1, \dots, C_J$, удовлетворяющее условию (1), необходимо и достаточно, чтобы в задаче $(J+1)$-MSSC существовало разбиение множества $\widetilde{V}$ на кластеры $B_1, \dots, B_{J+1}$ такое, что

$$\sum_{j=1}^{J+1} \sum_{\boldsymbol{v} \in B_j} \|\boldsymbol{v} - \bar{v}(B_j)\|^2 \leqslant \widetilde{K}. \tag{2}$$

Необходимость. Пусть в задаче J-MSSC существует разбиение множества V на кластеры $C_1, \dots, C_J$ такое, что выполняется неравенство (1). Тогда нетрудно убедиться, что в задаче $(J+1)$-MSSC существует разбиение множества $\widetilde{V}$ на кластеры $B_1 = C_1, \dots, B_J = C_J,\ B_{J+1} = \{\boldsymbol{x}\}$ такое, что выполнено (2). Действительно,

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^{J+1} \sum_{\boldsymbol{v} \in B_j} \|\boldsymbol{v} - \bar{\boldsymbol{v}}(B_j)\|^2 = \\
&= \sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{v} \in B_j} \|\boldsymbol{v} - \bar{\boldsymbol{v}}(B_j)\|^2 + \sum_{\boldsymbol{v} \in B_{J+1}} \|\boldsymbol{v} - \bar{\boldsymbol{v}}(B_{J+1})\|^2 = \\
&= \sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{v} \in B_j} \|\boldsymbol{v} - \bar{\boldsymbol{v}}(B_j)\|^2 + \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}\|^2 = \\
&= \sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{v} \in C_j} \|\boldsymbol{v} - \bar{\boldsymbol{v}}(C_j)\|^2 \leqslant K = \widetilde{K}.
\end{aligned}$$

Достаточность. Заметим сначала, что для любого подмножества $X \subseteq V$ такого, что $|X| > 1$, в составе которого имеется некоторый вектор $\boldsymbol{y}$, справедлива следующая цепочка равенств:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\boldsymbol{v} \in X} \|\boldsymbol{v} - \bar{\boldsymbol{v}}(X)\|^2 = \\
&= \sum_{\boldsymbol{v} \in X} \|\boldsymbol{v}\|^2 - 2 \sum_{\boldsymbol{v} \in X} (\boldsymbol{v}, \bar{\boldsymbol{v}}(X)) + |X|\, \|\bar{\boldsymbol{v}}(X)\|^2 = \\
&= \sum_{\boldsymbol{v} \in X} \|\boldsymbol{v}\|^2 - 2 \frac{\sum\limits_{\boldsymbol{v} \in X} \big(\boldsymbol{v}, \sum_{\boldsymbol{u} \in X} \boldsymbol{u}\big)}{|X|} + \frac{\big\|\sum_{\boldsymbol{v} \in X} \boldsymbol{v}\big\|^2}{|X|} = \\
&= \sum_{\boldsymbol{v} \in X} \|\boldsymbol{v}\|^2 - \frac{\big\|\sum_{\boldsymbol{v} \in X} \boldsymbol{v}\big\|^2}{|X|} = \\
&= \|\boldsymbol{y}\|^2 + \sum_{\boldsymbol{u} \in X \setminus \{\boldsymbol{y}\}} \|\boldsymbol{u}\|^2 - \frac{\|\boldsymbol{y}\|^2}{|X|} - \\
&- \frac{2\big(\boldsymbol{y}, \sum_{\boldsymbol{u} \in X \setminus \{\boldsymbol{y}\}} \boldsymbol{u}\big)}{|X|} - \frac{\big\|\sum_{\boldsymbol{u} \in X \setminus \{\boldsymbol{y}\}} \boldsymbol{u}\big\|^2}{|X|} = \\
&= \frac{|X| - 1}{|X|} \|\boldsymbol{y}\|^2 + \sum_{\boldsymbol{u} \in X \setminus \{\boldsymbol{y}\}} \|\boldsymbol{u}\|^2 - \\
&- \frac{\big\|\sum_{\boldsymbol{u} \in X \setminus \{\boldsymbol{y}\}} \boldsymbol{u}\big\|^2}{|X| - 1} + \frac{\big\|\sum_{\boldsymbol{u} \in X \setminus \{\boldsymbol{y}\}} \boldsymbol{u}\big\|^2}{|X| - 1} - \\
&- \frac{\big\|\sum_{\boldsymbol{u} \in X \setminus \{\boldsymbol{y}\}} \boldsymbol{u}\big\|^2}{|X|} - \frac{2\big(\boldsymbol{y}, \sum_{\boldsymbol{u} \in X \setminus \{\boldsymbol{y}\}} \boldsymbol{u}\big)}{|X|} =
\end{aligned}$$

$$= \frac{|X|-1}{|X|}\|\boldsymbol{y}\|^2 - \frac{2\sum_{\boldsymbol{u}\in X\setminus\{\boldsymbol{y}\}}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{y})}{|X|} +$$

$$+ \sum_{\boldsymbol{v}\in X\setminus\{\boldsymbol{y}\}} \|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(X\setminus\{\boldsymbol{y}\})\|^2 + \frac{\left\|\sum_{\boldsymbol{u}\in X\setminus\{\boldsymbol{y}\}}\boldsymbol{u}\right\|^2}{(|X|-1)|X|}. \quad (3)$$

Допустим теперь, что в задаче $(J+1)$-MSSC существует разбиение множества $\widetilde{V}$ на кластеры $B_1,\ldots,B_{J+1}$, удовлетворяющее неравенству (2). Не ограничивая общность, будем считать, что $\boldsymbol{x}\in B_{J+1}$.

Пусть $|B_{J+1}|=1$. Тогда $B_{J+1}=\{\boldsymbol{x}\}$, и в задаче J-MSSC существует разбиение множества V на кластеры $C_1=B_1,\ldots,C_J=B_J$ такое, что справедливо (1). В самом деле,

$$\sum_{j=1}^{J}\sum_{\boldsymbol{v}\in C_j}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(C_j)\|^2 =$$

$$=\sum_{j=1}^{J}\sum_{\boldsymbol{v}\in B_j}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(B_j)\|^2 + \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}\|^2 =$$

$$=\sum_{j=1}^{J}\sum_{\boldsymbol{v}\in B_j}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(B_j)\|^2 + \sum_{\boldsymbol{v}\in B_{J+1}}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(B_{J+1})\|^2 \leqslant$$

$$\leqslant \widetilde{K} = K.$$

Пусть $|B_{J+1}|>1$. Заметим, что цепочка равенств (3) справедлива при подстановке $X=B_{J+1}$ и $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}$. Сделав эту подстановку, найдём

$$\sum_{\boldsymbol{v}\in B_{J+1}}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(B_{J+1})\|^2 =$$

$$= \frac{|B_{J+1}|-1}{|B_{J+1}|}\|\boldsymbol{x}\|^2 - \frac{2\sum_{\boldsymbol{u}\in B_{J+1}\setminus\{\boldsymbol{x}\}}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{x})}{|B_{J+1}|} +$$

$$+ \sum_{\boldsymbol{v}\in B_{J+1}\setminus\{\boldsymbol{x}\}}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(B_{J+1}\setminus\{\boldsymbol{x}\})\|^2 +$$

$$+ \frac{\|\sum_{\boldsymbol{u}\in B_{J+1}\setminus\{\boldsymbol{x}\}}\boldsymbol{u}\|^2}{(|B_{J+1}|-1)|B_{J+1}|}. \quad (4)$$

В правой части (4) последние два члена неотрицательны. Напомним, что $\boldsymbol{x}=(2a+K+1,\ldots,\ldots,2a+K+1)$, и заметим, что $\|\boldsymbol{u}\|\leqslant a\sqrt{q}$ для всех $\boldsymbol{u}\in B_{J+1}$ по построению. Используя свойства скалярного произведения, для разности первых двух членов в правой части (4) получим оценку:

$$\frac{|B_{J+1}|-1}{|B_{J+1}|}\|\boldsymbol{x}\|^2 - \frac{2\sum_{\boldsymbol{u}\in B_{J+1}\setminus\{\boldsymbol{x}\}}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{x})}{|B_{J+1}|} \geqslant$$

$$\geqslant \frac{|B_{J+1}|-1}{|B_{J+1}|}\Big(q(2a+K+1)^2 - 2aq(2a+K+1)\Big) =$$

$$= \left(1-\frac{1}{|B_{J+1}|}\right)q(2a+K+1)(K+1) >$$

$$> qK/2 \geqslant K = \widetilde{K},$$

так как $q\geqslant 2$. Отсюда для задачи $(J+1)$-MSSC имеем:

$$\sum_{j=1}^{J+1}\sum_{\boldsymbol{v}\in B_j}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(B_{J+1})\|^2 =$$

$$=\sum_{j=1}^{J}\sum_{\boldsymbol{v}\in B_j}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(B_j)\|^2 + \sum_{\boldsymbol{v}\in B_{J+1}}\|\boldsymbol{v}-\bar{\boldsymbol{v}}(B_{J+1})\|^2 > \widetilde{K},$$

что противоречит условию (2). Следовательно, $|B_{J+1}|=1$, а для этого случая существование разбиения множества V на кластеры $C_1,\ldots,C_J$, удовлетворяющего условию (1), было показано выше.

Заключение

Доказана NP-полнота задачи MSSC в случае, когда размерность пространства и число кластеров соответственно является и не является частью входа задачи. Установленный факт дополняет известные результаты и закрывает вопрос о сложностном статусе возможных случаев задачи MSSC.

Литература

[1] *Кельманов А. В., Пяткин А. В.* О сложности некоторых задач поиска подмножеств векторов и кластерного анализа // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2009. — Т. 49, № 11. — С. 2059–2067.

[2] *Aloise D., Hansen P.* On the Complexity of Minimum Sum-of-Squares Clustering // Les Cahiers du GERAD, G-2007-50, 2007. — 12 p.

[3] *Aloise D., Deshpande A., Hansen P., Popat P.* NP-Hardness of Euclidean Sum-of-Squares Clustering // Les Cahiers du GERAD, G-2008-33, 2008. — 4 p.

[4] *Drineas P., Frieze A., Kannan R., Vempala S., Vinay V.* Clustering Large Graphs via the Singular Value Decomposition // Machine Learning. — 2004. — Vol. 56. — Pp. 9–33.

[5] *Garey M. R., Johnson D. S.* Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-completeness. — San Francisco: CA: Freeman, 1979. — 339 p.

[6] *Inaba M., Katch N., Imai H.* Applications of Weighted Voronoi Diagrams and Randomization to Variance-based Clustering // Proceedings of the 10-th annual symposium on Computational geometry, New York: Stony Brook. — 1994. — Pp. 332–339.

[7] *MacQueen J. B.* Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations // Proceedings of the 5-th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability. — 1967. — Vol. 1. — Pp. 281–297.

[8] *Mahajan M., Nimbhorkar P., Varadarajan K.* The Planar k-means Problem is NP-Hard // Lecture Notes in Computer Science. — 2009. — Vol. 5431. — Pp. 284–285.

[9] *Rao M.* Cluster Analysis and Mathematical Programming // J. Am. Stat. Assoc. — 1971. — Vol. 66. — Pp. 622–626.

Одна задача синтеза оптимального остовного дерева*

Ерзин А. И., Шамардин Ю. В.
adilerzin@math.nsc.ru; orlab@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет

В заданном графе с неотрицательными весами ребер требуется построить остовное дерево, в котором сумма по всем вершинам максимальных весов инцидентных вершине ребер минимальна. Доказана NP-трудность задачи; найдены частные случаи полиномиальной разрешимости; предложен 2-приближенный полиномиальный алгоритм; показано, что задача построения 1,00048-приближенного решения NP-трудна; предложен эвристический полиномиальный алгоритм.

One optimal spanning tree synthesis problem*

Erzin A. I., Shamardin Y. V.
Novosibirsk, Sobolev Institute of Mathematics SD RAS, Novosibirsk State University

A graph with nonnegative weights of the edges is given. The problem is to find a spanning tree in which the sum of maximal weight edges incident to each node is minimal. We prove the NP-compeness of the problem; find the special cases when the problem is polynomially solvable; propose a 2-approximation polynomial algorithm; show that getting a 1,00048-approximation solution is NP-hard problem; propose a heuristic polynomial algorithm.

Постановка задачи

Задан простой неориентированный взвешенный граф $G = (V, E)$ с множеством вершин V, $|V| = n$, и множеством ребер E. Пусть $c_{ij} \geqslant 0$ — *вес* ребра $\{i, j\} \in E$. Требуется найти остовное дерево T^* графа G, являющееся решением задачи:

$$W(T) = \sum_{i \in V} \max_{j \in N_i(T)} c_{ij} \to \min_{T}, \qquad (1)$$

где $N_i(T)$ — множество вершин, смежных с вершиной i в дереве T.

Задачи подобные (1) возникают в беспроводных сенсорных сетях (БСС), когда расположение сенсоров известно и требуется синтезировать граф, связывающий все сенсоры [1]. БСС состоит из множества сенсоров, которые размещены в области мониторинга и используют беспроводную связь для обмена информацией. Сенсоры, обеспечивающие покрытие, должны порождать *связный* граф. Энергозатраты на передачу данных пропорциональны дальности передачи. Поэтому минимизировать энергозатраты на передачу данных между сенсорами сети можно путем выбора дальности передачи каждого сенсора, что однозначно определяет коммуникационную сеть. В литературе в качестве коммуникационного графа сенсорной сети принято рассматривать остовное дерево *минимального* веса P, когда вес ребра, связывающего пару вершин, — это расстояние между этими вершинами [1]. Однако минимальный остов не всегда является оптимальным коммуникационным графом БСС.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 10-01-00149-а и № 10-07-92650-ИНД-а, а также ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. (гос. контракт 02.740.11.0429).

В работе [2] исследовалась задача определения дальности передачи каждой вершины таким образом, чтобы индуцировать сильно связный граф, в котором энергозатраты на связь минимальны. Для частных случаев, когда вершины расположены на прямой, предложены полиномиальные алгоритмы решения задачи. Доказана NP-трудность задачи в трехмерном пространстве.

В работе [3] рассмотрена аналогичная задача определения мощностей радиопередатчиков для передачи данных на два расстояния — «малое» и «большое». Показана NP-трудность задачи. Предложен полиномиальный алгоритм, который строит решение с числом передатчиков на большие расстояния, не превосходящим $11/6$ от числа таких передатчиков в оптимальном решении. Также предложен экспоненциальный $9/5$-приближенный алгоритм.

В данной работе доказана NP-трудность задачи (1) для произвольного графа G. Найдены частные случаи полиномиальной разрешимости задачи. Показано, что для полиномиальных алгоритмов отношение целевой функции на приближенном решении к оптимальному значению функционала принадлежит интервалу $(1{,}00048;\ 2]$ при условии $\mathsf{P} \neq \mathsf{NP}$. Предложен эффективный эвристический алгоритм.

Доказательство NP-трудности

Лемма 1. *Задача* (1) *является* NP*-трудной в сильном смысле.*

Доказательство. Сведем NP-трудную в сильном смысле задачу *минимальное вершинное покрытие* (МВП) к частному случаю задачи (1). В задаче МВП задан граф $G = (V, E)$, $|V| = n$, $|E| = m$. Требуется найти такое подмножество вершин $V' \subseteq V$ минимальной мощности, что для лю-

бого ребра $\{i,j\} \in E$ хотя бы одна из вершин i и j принадлежала V'.

В задаче *минимальное покрытие* (МП) дано множество объектов J, множество элементов I и параметры $a_{ij} = 1$, если элемент $i \in I$ покрывает объект $j \in J$, и $a_{ij} = +\infty$ в противном случае. Требуется найти подмножество $I' \subseteq I$ минимальной мощности, покрывающее все объекты.

МВП полиномиально сводится к МП. Чтобы в этом убедиться, достаточно положить $J = E$, $I = V$ и элемент $i \in I$ покрывает объект $e = (p,q) \in J$, если $i = p$ или $i = q$.

По произвольной индивидуальной задаче МП построим граф $G = (V,E)$, в котором множество вершин $V = \{0\} \cup I \cup J$, а множество ребер $E = \big\{\{0,i\}\colon i \in I\big\} \cup \big\{\{i,j\}\colon a_{ij} = 1,\ i \in I,\ j \in J\big\}$. Положим веса ребер $c_{0i} = 0,\ c_{ij} = a_{ij},\ i \in I,\ j \in J$. Тогда в *любом* остовном дереве T графа G для произвольной вершины $j \in J$ имеем $\max\limits_{i \in N_j(T)} c_{ij} = 1$, а для любой вершины $i \in I$ либо $\max\limits_{j \in N_i(T)} c_{ij} = 1$ (вершина i связана с некоторой вершиной $j \in N_i(T)$), либо $\max\limits_{j \in N_i(T)} c_{ij} = 0$ (вершина i связана только с вершиной 0). Решение T^* такой задачи (1), назовем её задача $\mathcal{P}$, определяет минимальное покрытие $I' \subseteq I$, в которое войдут вершины множества I, смежные с вершинами множества J в дереве T^*. Таким образом, NP-трудная в сильном смысле задача МП полиномиально сведена к частному случаю задачи (1). Следовательно, задача (1) также является NP-трудной в сильном смысле.

Очевидно, полиномиального сведения задачи МП к задаче $\mathcal{P}$ достаточно для доказательства NP-трудности в сильном смысле задачи (1). Однако в дальнейшем мы используем полиномиальную сводимость задачи МВП к задаче (1), чтобы установить пределы аппроксимируемости задачи.

Частные случаи

Лемма 2. *Пусть граф G полный, и веса ребер принимают два значения $c_{ij} \in \{a,b\}$, $a < b$. Тогда задача* (1) *полиномиально разрешима.*

Доказательство. Построим следующий минимальный остов, начиная с тривиального графа $(V,\varnothing)$. Добавим максимальное количество ребер, веса a, чтобы получились ациклические компоненты связности (пусть m — число компонент связности). Для построения остовного дерева необходимо связать компоненты связности $m-1$ ребром. Для этого в каждой компоненте связности выберем по *одной* вершине и свяжем их ребрами веса b, чтобы получилось остовное дерево.

Просто строятся оптимальные деревья также в следующих двух случаях.

1. Пусть $c_{ij} \in \{a_1, a_2, \ldots\},\ a_i < a_{i+1}$. В тривиальное дерево $(V,\varnothing)$ добавим ребра длины a_1, чтобы получилось минимальное число ациклических компонент связности. Если в каждой компоненте связности можно выбрать по одной вершине и связать эти вершины ребрами длины a_2, то построенное таким образом дерево является оптимальным решением задачи (1).

2. Пусть $c_{ij} \in [a,b],\ (i,j) \in E$. Если веса всех ребер в минимальном остове P равны a, то P является оптимальным решением задачи (1).

В [4] рассматриваются регулярные покрытия плоскости кругами двух радиусов. Во всех рассмотренных в [4] покрытиях минимальные остовы содержат только ребра минимальной длины. Значит, в этих покрытиях в качестве оптимального коммуникационного дерева корректно использовать минимальный остов. С другой стороны в [1] предлагается покрытие, в котором используются круги трех радиусов (модель III). Минимальный остов, связывающий сенсоры в модели III, не является оптимальным коммуникационным деревом, и выводы авторов работы [1], относящиеся к энергоэффективности связи, не верны.

Оценки точности полиномиальных алгоритмов

Лемма 3. *Для любого остовного дерева T справедливы неравенства:*

$$\sum_{(i,j) \in T} c_{ij} \leqslant \sum_{i \in V} \max_{j \in N_i(T)} c_{ij} \leqslant 2 \sum_{(i,j) \in T} c_{ij}. \qquad (2)$$

Доказательство. Левое неравенство очевидно: если выбрать произвольную вершину в качестве корня дерева T, то у каждой вершины i будет одна вершина-предшественник $p(i)$ в пути в корень (предшественник вершины-корня совпадает с корнем), и вес дерева можно записать в виде

$$\sum_{(i,j) \in T} c_{ij} = \sum_{i \in V} c_{i,p(i)} \leqslant \sum_{i \in V} \max_{j \in N_i(T)} c_{ij}.$$

Правое неравенство в (2) следует из того факта, что каждое ребро инцидентно двум вершинам и, следовательно, его вес может войти в целевую функцию не более чем дважды. Лемма доказана.

Пусть T^* — решение задачи (1), то есть

$$W(T^*) = W^* = \min_T W(T),$$

а

$$C = \sum_{(i,j) \in P} c_{ij} = \min_T \sum_{(i,j) \in T} c_{ij}$$

— вес минимального остова P.

Упорядочим ребра, вошедшие в минимальный остов P, согласно их весам $a = c_1 \leqslant c_2 \leqslant \ldots \leqslant c_{n-1} = b$. Пусть число ребер дерева P, вес которых учтен в целевой функции $W(P)$ дважды, равно k, число ребер дерева P, вес которых учтен в целевой функции один раз, равно l, и число ребер

дерева P, вес которых не вошел в $W(P)$, равно m. Тогда $k+l+m=n-1$, а $2k+l=n$. Отсюда следует, что $l=n-2k$ и $m=k-1$. Значит,

$$W(P) \leqslant 2\sum_{i=n-k}^{n-1} c_i + \sum_{i=n-k-l}^{n-k-1} c_i = \\ = 2\sum_{i=n-k}^{n-1} c_i + \sum_{i=k}^{n-k-1} c_i = 2C - \left(\sum_{i=1}^{k-1} c_i + \sum_{i=1}^{n-k-1} c_i\right).$$

В последних скобках $n-2$ слагаемых, сумма которых убывает с ростом k. С учетом неравенства $k \leqslant (n-1)/2$, получаем

$$W(P) \leqslant 2C - \sum_{i=1}^{[(n-1)/2]-1} c_i - \sum_{i=1}^{n-[(n-1)/2]-1} c_i \leqslant \\ \leqslant 2C - 2\sum_{i=1}^{[(n-1)/2]-1} c_i \leqslant 2C - a(n-2).$$

Следовательно,

$$\varepsilon(P) = \frac{W(P)}{W(T^*)} \leqslant 2 - \frac{a(n-2)}{C} = \varepsilon_1(C).$$

С другой стороны $\varepsilon(P) \leqslant bn/C = \varepsilon_2(C)$. Вес C минимального остова P не известен заранее. Однако $\varepsilon_1(C)$ возрастает, а $\varepsilon_2(C)$ убывает и, следовательно, можно найти такое $\bar{C} \in [a(n-1), b(n-1)]$, при котором $\varepsilon_1(\bar{C}) = \varepsilon_2(\bar{C})$.

Имеем $\bar{C} = ((a+b)(n-2)+2b)/2$ и

$$\varepsilon(P) \leqslant \min_C\{\varepsilon_1(C), \varepsilon_2(C)\} \leqslant \varepsilon_1(\bar{C}) = \\ = \varepsilon_2(\bar{C}) = 2 - \frac{2a}{a+b+2b/(n-2)}.$$

Таким образом, доказана

Теорема 4. *Пусть веса ребер, вошедших в минимальный остов P, принадлежат отрезку $[a,b]$. Тогда справедлива достижимая оценка*

$$\varepsilon(P) = \frac{W(P)}{W(T^*)} \leqslant 2 - \frac{2a}{a+b+2b/(n-2)}, \quad (3)$$

и при $n \to +\infty$

$$\varepsilon(P) \leqslant 2b/(a+b). \quad (4)$$

Для доказательства достижимости оценки (3) приведен частный случай задачи (1).

В [1] рассматривается упомянутая выше модель покрытия III, где в качестве коммуникационной сети используется минимальный остов, связывающий узлы бесконечной решетки, в который входят ребра веса $c_1 \approx 0{,}071$, $c_2 \approx 0{,}095$ и $c_3 \approx 1{,}071$. Значит, согласно (4) относительная погрешность для минимального остовного дерева P_{III} равна

$$\frac{W(P_{\text{III}}) - W(T^*)}{W(T^*)} \leqslant \frac{2 \cdot 1{,}071}{1{,}142} - 1 \approx 0{,}87.$$

Напомним, что в задаче МВП задан граф $G = (V, E)$, $|V| = n$, $|E| = m$. Из Леммы 1 следует, что любую задачу МВП можно свести к частному случаю задачи (1) — задаче $\mathcal{P}$.

Предположим, что задача построения R-приближенного ($R > 1$) решения для МВП является NP-трудной.

Пусть некоторый полиномиальный алгоритм A строит Q-приближенное решение задачи $\mathcal{P}$, т.е.

$$1 \leqslant \frac{W(T_A)}{W^*} \leqslant Q, \quad (5)$$

где $W^* = W(T^*) = n^* + m$ — оптимальное значение целевой функции задачи $\mathcal{P}$, в котором n^* элементов множества I покрывают все объекты, а $W(T_A) = n' + m$ — значение функционала задачи $\mathcal{P}$ на дереве, построенном алгоритмом A.

Из предположения следует, что

$$\frac{n'}{n^*} = \frac{W(T_A) - m}{W^* - m} > R.$$

Из (5) имеем $W(T_A) \leqslant QW^*$. Значит, $QW^* - m \geqslant R(W^* - m)$ и $Q \geqslant R - (R-1)m/W^*$.

Предположим, что степень графа G равна $\Delta \leqslant k$. Известно, что МВП NP-трудна при $k \geqslant 3$ [5].

Так как каждый элемент покрывает не более k объектов, то $n^* \geqslant m/k$. Следовательно, $W^* \geqslant m/k + m$ и $Q \geqslant 1 + (R(k)-1)/(k+1)$.

В общем случае R зависит от k, поэтому в последнем выражении написано $R(k)$. Например, если $P \neq \text{NP}$, то при $k=5$ не существует 1,0029-приближенного полиномиального алгоритма для задачи МВП [5]. Значит, $Q \geqslant 1{,}00048$, и мы доказали следующее утверждение.

Теорема 5. *Если $P \neq$ NP, то не существует 1,00048-приближенного полиномиального алгоритма для задачи* (1).

Эвристический алгоритм

Вместо графа $G = (V, E)$ рассмотрим полный n-вершинный ориентированный граф K_n, в котором между каждой парой вершин $i, j \in V$ существует дуга (i,j) веса $c_{ij} \geqslant 0$ и дуга (j,i) веса $c_{ji} \geqslant 0$.

Ниже предлагается способ приближенного решения задачи (1), когда $N_i(T) = \{j \in V : (i,j) \in T\}$. Коротко он заключается в следующем. Сначала строится нижняя оценка оптимума задачи (1) путем решения задачи о минимальном остове графа относительно специальных весов ребер. Затем к минимальному остову, найденному при вычислении нижней оценки, применяется процедура локального улучшения. Результирующее дерево является искомым приближенным решением задачи (1).

Введем обозначения:

$$c_i = \min_{j\in V,\ j\neq i} c_{ij},\ i\in V;\quad c=\sum_{i\in V} c_i;$$
$$a_{ij} = c_{ij} - c_i,\ i,j\in V,\ i\neq j.$$

Функционал (1) принимает вид

$$W(T) = c + \sum_{i\in V} \max_{j\in N_i(T)} a_{ij}. \qquad (6)$$

Рассмотрим некоторую вершину i графа K_n. Остальные вершины упорядочим по неубыванию весов a_{ij}, т.е. $a_{ij_1} = 0 \leqslant a_{ij_2} \leqslant \ldots \leqslant a_{ij_{n-1}}$. Неубывающую функцию $g_i(k) = a_{ij_k}$, $k = 1,\ldots,n-1$, назовем весовой функцией вершины i. Через $h_i(k)$ обозначим произвольную неотрицательную неубывающую миноранту функции $g_i(k)$, то есть

$$h_i(1) = 0 \leqslant h_i(2) \leqslant \ldots \leqslant h_i(n-1),$$
$$h_i(k) \leqslant g_i(k),\quad k = 1,\ldots,n-1.$$

Через z_{ij} обозначим приращения миноранты h_i, относимые к дугам (i,j) и вычисляемые по формулам $z_{ij_1} = 0$, $z_{ij_k} = h_i(k) - h_i(k-1)$, $k = 2,\ldots,n-1$. С учетом (6) и введенных обозначений получаем цепочку неравенств

$$W(T) - c = \sum_{i\in V} \max_{j_k\in N_i(T)} g_i(k) \geqslant \sum_{i\in V} \max_{j_k\in N_i(T)} h_i(k) \geqslant$$
$$\geqslant \sum_{i\in V} \sum_{k|j_k\in N_i(T)} z_{ij_k} = \sum_{(i,j)\in T} (z_{ij} + z_{ji}). \qquad (7)$$

Через W^* обозначим оптимум задачи (1) и через (b_{ij}) — симметричную матрицу с элементами $b_{ij} = b_{ji} = z_{ij} + z_{ji}$. С учетом неравенств (7) получаем следующую нижнюю оценку L величины W^*:

$$W^* = \min_T W(T) \geqslant c + \min_T \sum_{(i,j)\in T} b_{ij} = L. \qquad (8)$$

Расчет оценки L заключается в решении задачи о минимальном остовном дереве графа K_n с матрицей весов ребер (b_{ij}).

При вычислении нижней оценки (8) в качестве минорант h_i предлагается взять выпуклые оболочки весовых функций g_i, $i\in V$. Согласно (2), другая нижняя оценка для функционала (1) — это минимальный вес C остова, когда веса ребер равны c_{ij}. Значит, в качестве нижней оценки целевой функции задачи (1) можно взять $\max\{C, L\}$.

Пусть T — произвольное остовное дерево графа K_n и d — некоторый числовой параметр. Опишем процедуру локального улучшения дерева T.

Введем обозначения: R — текущее рекордное дерево, $D(T,d)$ — результирующее дерево на выходе процедуры.

Начальный шаг. Ребро $(i,j)\in T$ назовем *черным*, если $\min\{a_{ij}, a_{ji}\} \geqslant d$, и назовем белым в противном случае. Если все ребра дерева T оказываются одного цвета, то алгоритм заканчивает работу с результатом $D(T,d)$.

Пусть ребра дерева T имеют разные цвета. Его белые ребра образуют компоненты связности, которые обозначим через $S_1,\ldots,S_M$. Полагаем $R = T$.

В цикле по $m = 1,\ldots,M$ совершается

Общий шаг. Рассмотрим дерево R и компоненту S_m. Через B обозначим множество черных ребер, инцидентных вершинам из S_m, и через N — множество вершин, инцидентных ребрам из B и лежащих вне S_m.

Пусть $s\in S_m$, $E_s = \{(v,s),\ v\in N\}$, и $T_s = (R\setminus B)\cup E_s$. Из деревьев R, T_s, $s\in S_m$, выбираем наилучшее и обозначаем его через R, то есть $R = \arg\min\{W(R), W(T_s), s\in S_m\}$.

Конечный шаг. По завершении цикла по m полагаем $D(T,d) = R$.

Рассмотрим минимальное дерево T, полученное при расчете нижней оценки (8).

Положим $d_i = \max\limits_{j\in N_i(T)} a_{ij}$, $i\in V$.

Дерево $P = \arg\min\{W(D(T,d_i)),\ i\in V\}$ является искомым приближенным решением задачи (1).

Выводы

В работе осуществлена математическая постановка задачи комбинаторной оптимизации, которая адекватно отражает проблему построения коммуникационной сети в некоторых технических системах (например, в беспроводных сенсорных сетях). Доказана NP-трудность задачи. Найдены частные случаи её полиномиальной разрешимости. Показано, что минимальный остов является 2-приближенным решением, и что задача построения 1,00048-приближенного решения NP-трудна. Предложен полиномиальный эвристический алгоритм.

Литература

[1] *Wu J., Yang S.* Energy-Efficient Node Scheduling Models in Sensor Networks with Adjustable Ranges // Int. J. of Foundations of Computer Science. — 2005. — V. 16, No. 1. — P. 3–17.

[2] *Kirousis L.M., Kranakis E., Krizanc D, Pelc A.* Power consumption in packet radio networks // Theoretical Computer Science. — 2000. — No. 243. — P. 289–305.

[3] *Carmi P., Katz M.L.* Power Assignment in Radio Networks with Two Power Levels // Algorithmica. — 2007. — No. 47. — P. 183–201.

[4] *Астраков С.Н., Ерзин А.И., Залюбовский В.В.* Сенсорные сети и покрытие плоскости кругами // Дискретный анализ и исследование операций. — 2009. — Т. 16, № 3. — С. 3–19.

[5] *Berman P., Karpinski M.* On some tighter inapproximability results // Tech. Report TR98-065, ECCC.

Эффективные алгоритмы решения специальных случаев квадратичной задачи о назначениях на сетях*

Забудский Г. Г., Лагздин А. Ю.
zabudsky@ofim.oscsbras.ru, art.lagzdin@gmail.com
Омск, Омский филиал Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН

Рассматривается постановка квадратичной задачи о назначениях в терминах теории графов. Структура связей между размещаемыми объектами определяется с помощью взвешенного графа. Позиции, в которые размещаются объекты, являются узлами сети. Излагаются полиномиальные алгоритмы решения задачи со специальными типами графов и сетей.

Effective algorithms for solving special cases of the quadratic assignment problem on networks*

Zabudsky G. G., Lagzdin A. Yu.
Omsk Branch of Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Omsk, Russia

The quadratic assignment problem defined in terms of graphs is considered. Structure of connections between facilities is defined by a weighted graph. Positions in which the facilities will be located are nodes of a weighted network. We provide some polynomial algorithms for solving special cases of the problem.

В докладе рассматривается известная задача дискретной оптимизации — квадратичная задача о назначениях (КЗН). Впервые она была сформулирована в [15]. Ее модель является основой для математических моделей многих прикладных задач, в которых необходимо разместить связанные между собой объекты в заданной области. Наиболее известное приложение — автоматизация проектирования генеральных планов предприятий, цехов, печатных плат и т. д. [1, 8, 10, 13]

Одним из основных направлений исследования КЗН является поиск полиномиально разрешимых случаев [3, 9, 10, 11, 12, 14]. Доклад посвящен изложению полиномиальных алгоритмов в случае, когда задача сформулирована в терминах теории графов. Такая постановка заключается в следующем [4, 5, 7, 10, 13]. Структура связей между размещаемыми объектами представлена в виде реберно-взвешенного обыкновенного графа. Вершины соответствуют объектам, а ребро положительного веса присутствует в графе в том случае, если сопоставленные вершинам объекты связаны между собой. Позиции, в которые производится размещение, являются узлами неориентированной сети. Критерий — минимальная суммарная стоимость связей между объектами.

Для данной постановки КЗН интерес представляет построение эффективных (полиномиальных) алгоритмов для специальных видов графов и сетей. Известны такие алгоритмы для случаев, например, когда граф и сеть состоят из двух долей [7], или если они являются изоморфными деревьями [10]. В данном направлении выделяется подкласс задач нумерации, которые являются частными случаями указанной постановки КЗН в случае размещения невзвешенного графа на невзвешенной цепи. Результаты в этой области изложены, в частности, в [6].

В докладе приведены полиномиальные алгоритмы решения КЗН для некоторых видов графов и сетей.

Постановка задачи

Имеется неориентированный взвешенный граф $LW = (N, E)$ без петель и кратных ребер. Символ W означает, что граф взвешенный. Если веса одинаковы, то этот символ опускается. Каждому ребру $(n_i, n_j) \in E$ приписан вес $w(n_i, n_j) > 0$, т. е. удельная стоимость связи между размещаемыми объектами n_i и n_j. Пусть $MW = (V, U)$ — это сеть без петель и кратных дуг. Дуге $(v_i, v_j) \in U$ приписан вес $r(v_i, v_j) > 0$. Считаем, что $|V| = |N| = m$. Размещением графа LW на сети MW будем называть взаимно однозначное отображение $\pi\colon N \to V$. Необходимо разместить вершины графа LW в узлы сети MW по одной в каждый таким образом, чтобы суммарная стоимость связей между вершинами графа LW была минимальной. Целевая функция имеет вид:

$$F_1(\pi) = \sum_{(n_i,n_j)\in E} w(n_i, n_j)\rho(\pi(n_i), \pi(n_j)) \to \min_{\pi},$$

где $\rho(\pi(n_i), \pi(n_j))$ — кратчайшее расстояние между узлами $\pi(n_i)$ и $\pi(n_j)$ в сети MW, в которые размещены вершины n_i и n_j графа LW. Такую задачу размещения будем обозначать тройкой (LW, MW, F_1). Отметим, что задача (L, M, F_1) NP-трудна, когда M — цепь, а L — произвольный граф [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-01-00598.

Древовидные сети

Даны древовидная сеть $TW = (V, U)$ с известными весами дуг и невзвешенная цепь $Ch = (N, E)$. Рассмотрим задачу размещения (Ch, TW, F_1).

Для простоты обозначений в дальнейшем будем считать, что вершины цепи последовательно перенумерованы числами $\{1, \ldots, m\}$. Через $d(v)$ обозначим степень узла $v \in V$.

Выделим в сети TW некоторую цепь $C_0 = (V_0, U_0)$, $V_0 = \{k_1, \ldots, k_p\}$. Каждому узлу $k_i \in V_0$ сопоставим поддерево $T_i = (V_i, U_i)$. Множество V_i состоит из k_i и всех тех узлов дерева TW, которые соединены с k_i цепями, не содержащими дуг из U_0. Множество U_i образовано дугами таких цепей. Пусть $m_i = |V_i \backslash \{k_i\}|$.

Опишем алгоритм $A1$ построения оптимального размещения π^* для задачи (Ch, TW, F_1). Его идея состоит в построении маршрута, проходящего по всем узлам сети TW как минимум один раз и минимального по суммарному весу входящих в него дуг.

Алгоритм $A1$**.**

Шаг 1. Выделим в сети TW цепь $(v_{i_1}, \ldots, v_{i_k})$ максимальной длины: $\rho(v_{i_1}, v_{i_k}) = \max\limits_{v_i, v_j \in V} \rho(v_i, v_j)$.

Шаг 2. Последовательно рассматриваем узлы выделенной цепи: полагаем $\pi^*(1) = v_{i_1}$, $\pi^*(2) = v_{i_2}$. Далее, если $d(v_{i_2}) = 2$, то $\pi^*(3) = v_{i_3}$, а если $d(v_{i_2}) > 2$, то $\pi(|V_{i_2}| + 2) = v_{i_3}$. Для размещения вершин $\{3, \ldots, |V_{i_2}| + 1\}$ применяется редуцированный вариант данного алгоритма для поддерева T_{i_2}: в T_{i_2} выделяется цепь, соединяющая его корень и произвольный висячий узел, после чего размещение производится аналогично основному алгоритму.

Отметим, что трудоемкость алгоритма $A1$ не превосходит $O(m^3)$. Действительно, на шаге 1 выбирается главная цепь максимальной длины, трудоемкость этой операции составляет $O(m^3)$, а на шаге 2 последовательно размещаются вершины цепи в узлы дерева с трудоемкостью $O(m)$. Справедливо

Утверждение 1. *Задача* (Ch, TW, F_1) *разрешима за* $O(m^3)$ *операций.*

Аналогично задаче (Ch, TW, F_1), можно рассмотреть задачу размещения невзвешенного цикла Cy на взвешенном дереве TW, т. е. задачу (Cy, TW, F_1). Для построения оптимального решения указанной задачи цикл «разрезается» по произвольному ребру (например, по ребру $(m, 1)$), и полученная цепь размещается в соответствии с алгоритмом $A1$ с выбором на шаге 1 произвольной цепи в сети TW. Поскольку на шаге 1 не требуется производить поиск цепи максимальной длины, трудоемкость такого алгоритма составляет $O(m)$. Имеет место

Утверждение 2. *Задача* (Cy, TW, F_1) *разрешима за* $O(m)$ *операций.*

Специальные и произвольные сети

Определение 1. *Граф* $S = (V, U)$, $|V| = m$, *называется звездой, если существует вершина* $v_1 \in V$, *степень которой равна* $m-1$, *а степени всех остальных вершин равны* 1. *Вершина* v_1 *— это центр звезды [4, 6].*

Пусть LW — произвольный взвешенный граф. Через SW обозначим взвешенную звезду. Тогда справедливо

Утверждение 3. *Задача* (LW, SW, F_1) *разрешима за* $O(m^2)$ *операций.*

Изложим алгоритм поиска оптимального решения сформулированной задачи.

Алгоритм $A2$**.**

Шаг 1. Упорядочиваем вершины графа LW по невозрастанию суммарной стоимости связей со смежными вершинами. Если $Z(n_i) = \sum\limits_{j=1}^{m} w(n_i, n_j)$, $i = 1, \ldots, m$, то пусть нумерация вершин N графа LW такова, что $Z(n_1) \geqslant Z(n_2) \geqslant \ldots \geqslant Z(n_m)$.

Шаг 2. Узлы $v_i \in V$, $i = 1, \ldots, m$, сети SW упорядочиваем по неубыванию расстояний от центра v_1, т. е. выполняются неравенства $r(v_1, v_2) \leqslant \leqslant r(v_1, v_3) \leqslant \ldots \leqslant r(v_1, v_m)$.

Шаг 3. Полагаем $\pi(n_1) = v_1, \ldots, \pi(n_m) = v_m$.

Нетрудно заметить, что трудоемкость алгоритма $A2$ определяется затратами на вычисление суммарного веса инцидентных дуг для каждого узла и упорядочение m-мерного массива и поэтому не превосходит $O(m^2)$ операций.

Рассмотрим задачу размещения взвешенной звезды $SW = (N, E)$ на произвольной взвешенной сети $MW = (V, U)$, т. е. задачу (SW, MW, F_1).

Утверждение 4. *Задача* (SW, MW, F_1) *разрешима за* $O(m^3)$ *операций.*

Приведем алгоритм $A3$ построения оптимального решения указанной задачи.

Алгоритм $A3$**.**

Шаг 1. Строим матрицу кратчайших расстояний между всеми парами узлов сети MW. Матрица имеет m строк и $m-1$ столбец, т. е. не учитываются нулевые диагональные элементы.

Шаг 2. Упорядочиваем элементы строк полученной матрицы по неубыванию, получаем матрицу $K = (k_{ij})$, $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, m-1$.

Шаг 3. Упорядочиваем вершины графа SW по невозрастанию стоимости связи с центром $n_1 \in N$, т. е. $w(n_1, n_2) \geqslant w(n_1, n_3) \geqslant \ldots \geqslant w(n_1, n_m)$.

Шаг 4. Находим минимальное покомпонентное произведение каждой из строк матрицы K на вектор стоимостей связи с центром звезды. Пусть минимум достигается в строке, соответствующей узлу v_1, причем столбцы в данной строке соответствуют узлам $v_2, \ldots, v_m$.

Шаг 5. Полагаем $\pi(n_1) = v_1, \ldots, \pi(n_m) = v_m$.

Отметим, что предварительно некоторые строки матрицы K можно удалить из рассмотрения. Для этого вводится понятие доминирования строк. Строка с номером i доминирует строку с номером s, если $k_{ij} \leqslant k_{sj}$ для всех $j = 1, \ldots, m-1$.

Трудоемкость алгоритма $A3$ определяется количеством операций, необходимых для построения кратчайших расстояний между всеми парами узлов — $O(m^3)$, и упорядочением строк матрицы K — $O(m^2 \log m)$, и поэтому не превосходит $O(m^3)$ операций.

Отметим, что для решения задач (LW, S, F_1) и (S, MW, F_1) достаточно в графе LW и сети MW соответственно найти 1-медиану, т. е. вершину (узел), сумма кратчайших расстояний от которой до всех других минимальна. В первой задаче необходимо разместить медиану в центр звезды, а во второй — центр звезды в медиану. Остальные вершины размещаются произвольно.

Выводы

Рассмотрена квадратичная задача о назначениях в постановке, когда структура связей между размещаемыми объектами представлена в виде графа, а область, в которой производится размещение, — в виде сети. Предложены полиномиальные алгоритмы размещения невзвешенных цепи и цикла на взвешенном дереве произвольной структуры, а также графа общего вида на звезде и звезды на произвольной сети для взвешенных случаев.

Открытой, в частности, остается проблема полиномиальной разрешимости КЗН в случае, когда граф и сеть гомеоморфны звезде [6]. Кроме того, интерес представляет рассмотрение КЗН с минимаксным критерием (quadratic bottleneck assignment problem) [5, 10, 13].

Литература

[1] *Ахмедов И. С., Сигал И. Х.* Задача компоновки схемы госплана предприятий и некоторые подходы к ее решению // Деп. ВИНИТИ М. — 1983. — № 270.

[2] *Гэри М., Джонсон Д.* Вычислительные машины и труднорешаемые задачи. — М.: Мир, 1982. — 416 с.

[3] *Демиденко В. М.* Обобщение условий сильной разрешимости квадратичной задачи о назначениях с матрицами анти-Монжа и Теплица // Доклады НАН Беларуси. — 2003. — Т. 47, № 2. — С. 15–18.

[4] *Забудский Г. Г.* О некоторых задачах размещения на графах // Труды XI Байкальской международной школы-семинара «Методы оптимизации и их приложения», Иркутск, 1998. — С. 135–138.

[5] *Забудский Г. Г., Лагздин А. Ю.* Алгоритм решения квадратичной задачи о назначениях с минимаксным критерием на дереве // Материалы VII Международной научно-технической конференции «Динамика систем, механизмов и машин», Омск, 2009. — Т. 3. — С. 23–27.

[6] *Иорданский М. А.* Задачи размещения графов 2 // Межвуз. сб. «Комбинаторно-алгебраические методы в прикладной математике», Горький, ГГУ им. Лобачевского, 1982. — С. 26–65.

[7] *Метельский Н. Н.* Методы локальной оптимизации для задачи размещения двудольных графов // Журнал вычислительной математики и математической физики, М. — 1984. — Т. 24, № 9. — С. 1428–1432.

[8] *Сергеев С. И.* Квадратичная задача назначения I // Автоматика и телемеханика. — 1999. — № 8. — С. 127–147.

[9] *Burkard R. E., Cela E., Rote G., Woeginger G. J.* The quadratic assignment problem with a monotone anti-Monge matrix and a symmetric Toeplitz matrix: Easy and hard cases // Mathematical Programming (Series B). — 1998. — Vol. 82. — Pp. 125–158.

[10] *Burkard R. E., Dell'Amico M., Mortello S.* Assignment problems. — Philadelphia: SIAM, 2009. — 382 p.

[11] *Cela E.* The quadratic assignment problem: Theory and algorithms. — Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1998. — 287 p.

[12] *Demidenko V. M., Finke G., Gordon V. S.* Well solvable cases of the quadratic assignment problem with monotone and bimonotone matrices // Journal of Mathematical Modelling and Algorithms. — 2006. — Vol. 5, No. 2. — Pp. 167–187.

[13] *Farahani R. Z., Hekmatfar M.* Facility location: Concepts, models, algorithms and case studies. — Heidelberg: Physica-Verlag, 2009. — 549 p.

[14] *Finke G., Burkard R. E., Rendl F.* Quadratic assignment problems // Annals of Discrete Mathematics. — 1987. — No. 31. — Pp. 61–82.

[15] *Koopmans T. C., Beckman M.* Assignment Problems and the Location of Economic Activities // Econometric. — 1957. — No. 25, — Pp. 53–76.

Оценки среднего числа итераций для некоторых алгоритмов решения задачи о рюкзаке*

Заозерская Л. А., Колоколов А. А., Гофман Н. Г.
zaozer@ofim.oscsbras.ru, kolo@ofim.oscsbras.ru, rgk7@treasury.ru
Омск, Омский филиал Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского

Работа посвящена полиномиальным верхним оценкам среднего числа итераций некоторых алгоритмов целочисленного линейного программирования при решении многомерной задачи о рюкзаке и задачи об упаковке множества. Приводятся обзор полученных ранее результатов и некоторые новые оценки.

Bounds on average number of iterations of some algorithms for solving the knapsack problem*

Zaozerskaya L. A., Kolokolov A. A., Gofman N. G.
Omsk Branch of Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Omsk State University, Omsk, Russia

This paper is devoted to the polynomial upper bounds on average number of iterations for some integer linear programming algorithms for solving the multidimensional knapsack problem and the set packing problem. A survey of earlier derived results and some new bounds are given.

Значительное число работ в области оценки трудоемкости алгоритмов оптимизации проведено на основе исследования худшего случая, т. е. анализа максимально возможного числа операций, выполняемых алгоритмом на определенном классе задач. Вместе с тем большое значение для более полной оценки возможностей алгоритмов имеет наличие информации о поведении алгоритмов в среднем.

В [2, 3] предложен и развивается подход к построению верхних оценок среднего числа итераций для известных алгоритмов целочисленного линейного программирования (ЦЛП), а именно некоторых алгоритмов отсечения, метода ветвей и границ (схема Лэнд и Дойг), алгоритма перебора L-классов. На основе этого подхода построены указанного типа оценки для задачи об упаковке множества. Идея данного подхода состоит в использовании детерминированных верхних оценок числа итераций, полученных в рамках метода регулярных разбиений [5] (в частности, для L-разбиения и нижнего кубического разбиения), и верхних оценок среднего числа допустимых решений задач целочисленного программирования. Для задачи о рюкзаке и задачи об упаковке множества такие оценки числа допустимых решений построены в [6, 7].

Данная работа посвящена обзору результатов по верхним оценкам среднего числа итераций для указанных алгоритмов ЦЛП при решении многомерной задачи о рюкзаке с булевыми переменными. Кроме того, приводятся новые оценки среднего числа итераций для этой задачи и задачи об упаковке множества.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-01-00598.

Предварительные сведения

Далее изучается вопрос об эффективности решения рассматриваемых задач при некотором распределении исходных данных такими алгоритмами ЦЛП, как первый алгоритм Гомори, ветвей и границ, перебор L-классов, динамическое программирование (ДП). Для задач со случайными исходными данными время работы алгоритма является случайной величиной. *Средним временем* работы алгоритма называется математическое ожидание времени работы алгоритма. Алгоритм $\mathcal{A}$ называется *полиномиальным в среднем*, если среднее время его работы $T_{\mathcal{A}}$ ограничено полиномом от длины входа W, т. е. существует $\mu > 0$ такое, что $\mathsf{E}\, T_{\mathcal{A}} = O(W^{\mu})$.

Для анализа алгоритмов решения рассматриваемых задач нами был использован *метод регулярных разбиений* [5]. Одним из таких разбиений пространства R^n является *L-разбиение*, которое определяется следующим образом [5]. Каждая точка из Z^n образует отдельный *L-класс*, т. е. элемент разбиения. Точки $x, y \in R^n$ ($x \succ y$ и $x, y \notin Z^n$) принадлежат одному *дробному* L-классу, если не существует $z \in Z^n$ такой, что $x \succ z \succ y$. Здесь $\succ$ — знак лексикографического сравнения.

Пусть $X \subset R^n$. Фактор-множество X/L называется *L-структурой* X, а его мощность обозначается через $|X/L|$.

Подмножество $Q = \{V_k, \ldots, V_l\}$ дробных классов из X/L называется *L-комплексом*, если не существует $z \in X \cap Z^n$ такой, что $V_k \succ z \succ V_l$. Через $C(X)$ обозначим совокупность всех L-ком-

плексов, порождаемых X, и определим

$$\Psi(X) = \max\{|Q|\colon Q \in C(X)\}.$$

В рамках метода регулярных разбиений были получены детерминированные верхние оценки числа итераций для ряда алгоритмов отсечения, перебора L-классов, алгоритма Лэнд и Дойг [8].

Для первого алгоритма Гомори на основе свойства *L-регулярности* его отсечений такая оценка [5] числа отсечений (итераций) построена через мощность L-накрытия допустимого множества M соответствующей задачи линейного программирования (ЛП). Обозначим через f^*, $\tilde{f}$ оптимальные значения целевой функции задачи ЦЛП и соответствующей ей задачи ЛП. Верхней оценкой числа отсечений первого алгоритма Гомори служит величина

$$\big(\lfloor\tilde{f}\rfloor - f^* + 1\big)|M/L|.$$

В алгоритмах перебора L-классов используется следующее свойство. Для ограниченного множества X имеет место

$$X/L = \{V_1, \ldots, V_r\}, \text{ где } V_i \succ V_{i+1},\ i = 1, \ldots, r-1.$$

Здесь $V_i \succ V_{i+1}$ означает, что для любых $x \in V_i$, $y \in V_{i+1}$ выполнено $x \succ y$.

Рассмотрим задачу ЦЛП, в которой целевая функция максимизируется. Процесс решения задачи алгоритмом перебора L-классов начинается с точки $\bar{x} = \operatorname{lexmax} M$. Основной шаг решения задачи состоит в переходе от одного L-класса релаксационного множества M к следующему за ним в порядке лексикографического убывания с учетом рекордного значения целевой функции. Поиск представителя очередного L-класса осуществляется посредством решения не более n вспомогательных подзадач ЛП. Процесс завершается, когда не удается найти представителя очередного L-класса. Лучшее из полученных целочисленных решений является оптимальным. Для алгоритма перебора L-классов число итераций не превышает $|M/L|$.

Под числом итераций алгоритма ветвей и границ (схема Лэнд и Дойг) далее будем понимать количество решенных задач ЛП. Для анализа числа итераций этого алгоритма полезным оказалось *нижнее кубическое разбиение* δ_0 [5] пространства R^n, порождаемое следующим образом. Каждая точка $z \in Z^n$ образует отдельный класс. Нецелочисленные точки $x, y \in R^n$ принадлежат одному дробному классу разбиения, если $\lfloor x_j\rfloor = \lfloor y_j\rfloor$, $j = 1, \ldots, n$. Фактор-множество M/δ_0 называется *δ_0-структурой* M.

Пусть S — последовательность приближений, порождаемая указанным алгоритмом. Любой дробный класс из M/δ_0 содержит не более n элементов S [5], т. е.

$$|S| \leqslant |D(n)| + n|M_f/\delta_0|, \tag{1}$$

где $M_f = M \setminus D(n)$. Здесь $D(n)$ — множество допустимых решений задачи ЦЛП, а $|D(n)|$ — его мощность. Для задач о рюкзаке и об упаковке множества оценка (1) принимает вид

$$|S| \leqslant (n+1)|D(n)|.$$

Число итераций алгоритма, для которых задачи ЛП неразрешимы, не превышает $n|M_f/\delta_0|$. Следовательно, для общего числа итераций алгоритма Лэнд и Дойг имеет место оценка

$$(2n+1)|D(n)|.$$

Таким образом, число итераций рассматриваемых алгоритмов можно оценить через мощность L- или δ_0-структуры многогранников задач, которая в свою очередь оценивается через $|D(n)|$. При построении рассматриваемых ниже оценок числа итераций для задач об упаковке множества и многомерном рюкзаке были использованы оценки в среднем величины $|D(n)|$ из [1, 6, 7].

Задача об упаковке множества

Приведем модель ЦЛП для задачи об упаковке множества:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \to \max \tag{2}$$

при условиях

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \leqslant 1, \quad i = 1, \ldots, m; \tag{3}$$

$$x_j \in \{0, 1\}, \quad j = 1, \ldots, n. \tag{4}$$

Здесь $a_{ij} \in \{0,\ 1\}$, c_j, b_i — неотрицательные целые числа, $i = 1, \ldots, m$, $j = 1, \ldots, n$; $x = (x_1, \ldots, x_n)^{\mathsf{T}}$ — вектор переменных задачи.

В [6] показано, что для задач об упаковке множества предложенный автором алгоритм ДП является полиномиальным в среднем при некотором распределении исходных данных, а именно математическое ожидание времени работы (числа операций) алгоритма ДП равно $O(n^2 m)$. Этот результат основан на полученной там же оценке

$$\mathsf{E}|D(n)| \leqslant 2n + 1. \tag{5}$$

Параметры предложенного в [6] класса задач об упаковке множества (2)–(4) удовлетворяют неравенству

$$mp^2 \geqslant \ln n. \tag{6}$$

Здесь p — вероятность появления единицы в матрице A. Далее этот класс задач будем обозначать через $\mathcal{P}(n, m, p)$.

Обозначим через M_P многогранник задачи ЛП, который определяется условиями (3) и неравенствами

$$x_j \geqslant 0,\ j = 1, \ldots, n.$$

Из (5) и свойства *альтернируемости* L-структуры релаксационного многогранника задачи об упаковке следует, что для задач из класса $\mathcal{P}(n, m, p)$ имеет место оценка

$$\mathsf{E}|M_P/L| \leqslant 4n + 1. \tag{7}$$

Напомним, что многогранник $M \subset R^n$ обладает альтернирующей L-структурой [5], если для множества M/L имеет место чередование в отношении лексикографического порядка целочисленных точек и дробных L-классов и кроме того, лексикографически максимальный и минимальный элементы M/L являются целочисленными. В этом случае

$$|M/L| \leqslant 2|D(n)| - 1.$$

Если в M существует $x \notin Z^n$, то для таких множеств $\Psi(M) = 1$.

Отметим, что ранее на основе оценки

$$|D(n)| \leqslant n^2 + 1$$

из [7] были построены полиномиальные верхние оценки среднего числа итераций для первого алгоритма Гомори, его модификации, алгоритма перебора L-классов и алгоритма Лэнд и Дойг [2, 3]. Используя неравенство (7) и приведенные выше детерминированные оценки числа итераций алгоритмов, нами получены следующие новые результаты.

Теорема 1. *При решении невзвешенных задач об упаковке множества из класса $\mathcal{P}(n, m, p)$ среднее число отсечений первого алгоритма Гомори не превышает $3n^2 - 2n - 1$.*

Теорема 2. *При решении задач из класса $\mathcal{P}(n, m, p)$ среднее число итераций алгоритма перебора L-классов с начальным рекордом, равным $\rho_0 = \max\limits_{j=1,\ldots,n} c_j$, не превышает $3n + 1$.*

Теорема 3. *При решении задач из класса $\mathcal{P}(n, m, p)$ среднее число итераций алгоритма Лэнд и Дойг не превышает $4n^2 + 4n + 1$.*

В [1] нами построено расширение $\tilde{\mathcal{P}}(n, m, p)$ указанного класса задач об упаковке множества, для которого также справедливы оценка (7) и теоремы 1–3. В нем элементы матрицы A также являются независимыми случайными величинами, причем $P\{a_{ij} = 1\} = p$, а $P\{a_{ij} = 0\} = 1 - p$, $i = 1, \ldots, m,\ \ j = 1, \ldots, n$. Кроме того, выполнено неравенство

$$p \geqslant \sqrt{1 - \left(\frac{1}{n}\right)^{\frac{1}{m}}}.$$

Заметим, что среднее число допустимых решений для класса $\mathcal{P}(n, m, p)$ имеет ту же оценку, но условие (6) имеет смысл только при $m \geqslant \ln n$. При описании класса $\tilde{\mathcal{P}}(n, m, p)$ дополнительных условий для m и n не требуется. Кроме того, нетрудно показать, что для любых m и n выполняется неравенство

$$\sqrt{\frac{\ln n}{m}} \geqslant \sqrt{1 - \left(\frac{1}{n}\right)^{\frac{1}{m}}}.$$

Таким образом, класс $\tilde{\mathcal{P}}(n, m, p)$ действительно является расширением класса $\mathcal{P}(n, m, p)$.

Нами предложен новый класс задач об упаковке (2)–(4), для которого средняя мощность множества их допустимых решений имеет более высокий порядок по сравнению с классом из [6]. Для него также построены полиномиальные верхние оценки среднего числа итераций указанных алгоритмов.

Задача о рюкзаке

Приведем модель ЦЛП для многомерной задачи о рюкзаке:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \to \max \tag{8}$$

при условиях

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \leqslant b_i, \quad i = 1, \ldots, m; \tag{9}$$

$$x_j \in \{0,\ 1\}, \quad j = 1, \ldots, n. \tag{10}$$

Здесь a_{ij}, c_j, b_i — неотрицательные целые числа, $i = 1, \ldots, m,\ \ j = 1, \ldots, n;\ \ x = (x_1, \ldots, x_n)^{\mathsf{T}}$ — вектор переменных задачи.

Приведем описание предложенного в [6] класса задач о многомерном рюкзаке. Пусть векторы c и b фиксированы, а все элементы матрицы A — независимые случайные величины. Ненулевые элементы a_{ij} матрицы A удовлетворяют условию $P\{a_{ij} = t\} = p$ при $t = 1, \ldots, B$, а для нулевых a_{ij} имеем $P\{a_{ij} = 0\} = 1 - pB > 0$, где $B = \max\limits_{i=1,\ldots,m} b_i$. Кроме того, параметры задачи (8)– (10) удовлетворяют условию

$$m(pB)^2 \geqslant\ \gamma \ln n, \tag{11}$$

где $\gamma \geqslant 13$. Как показано в [6] для данного класса задач имеет место оценка (5) и математическое ожидание времени работы (числа операций) алгоритма ДП равно $O(n^2 m)$.

В отличие от класса из [6] для исследуемого нами класса задач о рюкзаке $\mathcal{K}(n,m,p)$ вероятность появления нуля в матрице A может быть равной нулю. В этом случае имеем равномерное дискретное распределение значений элементов матрицы A на множестве $\{1,\ldots,B\}$. Параметры задачи (8)–(10) также удовлетворяют условию (11).

Обозначим через M_K многогранник задачи ЛП, который определяется условиями (9) и неравенствами

$$0 \leqslant x_j \leqslant 1,\ j = 1,\ldots,n.$$

Ранее показано, что мощность L-комплексов из M_K/L не превышает числа переменных [5], т. е.

$$\Psi(M_K) \leqslant n.$$

Отсюда и из (5) вытекает, что при решении задач о рюкзаке из класса $\mathcal{K}(n,m,p)$ математическое ожидание мощности M_K/L не превышает

$$2n^2 + 3n + 1. \tag{12}$$

На ее основе в [4] получены результаты, приведенные ниже. Положим $c_{\max} = \max\limits_{j=1,\ldots,n} c_j$.

Теорема 4. *При решении задач о рюкзаке из класса $\mathcal{K}(n,m,p)$ среднее число отсечений первого алгоритма Гомори не превышает*

$$nc_{\max}(2n^2 + 3n + 1).$$

Отметим, что при решении невзвешенных задач (все $c_j = 1$) из класса $\mathcal{K}(n,m,p)$ среднее число отсечений указанного алгоритма не превосходит $2n^3 + 3n^2 + n$.

Нами предложен модифицированный вариант данного алгоритма, который имеет полиномиальную верхнюю оценку среднего числа итераций для задач из классов $\mathcal{K}(n,m,p)$, $\mathcal{P}(n,m,p)$, $\tilde{\mathcal{P}}(n,m,p)$ при произвольных фиксированных $c_j,\ j = 1,\ldots,n$.

Из оценки (12) следует

Теорема 5. *При решении задач о рюкзаке из класса $\mathcal{K}(n,m,p)$ среднее число итераций алгоритма перебора L-классов не превышает $2n^2 + 3n + 1$.*

Пусть $x^j \in B^n$ имеет единственную ненулевую компоненту с номером j. При решении задач о рюкзаке из класса $\mathcal{K}(n,m,p)$ среднее число итераций алгоритма перебора L-классов с начальным рекордом, равным $\rho_0 = \max\{c_j \mid x^j \in D(n)\}$, не превышает $2n^2 + 2n + 1$.

При решении задач о рюкзаке из класса $\mathcal{K}(n,m,p)$ верхняя оценка среднего числа итераций алгоритма Лэнд и Дойг совпадает с оценкой из теоремы 3.

Выводы

В работе представлены верхние оценки среднего числа итераций для некоторых алгоритмов ЦЛП при решении задач о рюкзаке и об упаковке множества. Получены расширения известных классов этих задач, для которых имеют место полиномиальные оценки рассматриваемого типа. Предложены новые классы задач об упаковке множества с полиномиальными оценками более высокого порядка.

В дальнейшем предполагается применить предложенный подход к анализу процессов решения других задач ЦЛП, например, задачи о покрытии множества.

Литература

[1] *Заозерская Л. А., Борисенко Д. А., Гофман Н. Г.* О числе допустимых решений задачи об упаковке множества // Материалы VII Международной научно-технической конференции «Динамика систем, механизмов и машин», Омск: ОмГТУ, 2009. — С. 31–35.

[2] *Заозерская Л. А., Колоколов А. А.* О среднем числе итераций некоторых алгоритмов для решения задачи об упаковке множества // Материалы XIV Байкальской международной школы-семинара «Методы оптимизации и их приложения», Иркутск, 2008. — С. 388–395.

[3] *Заозерская Л. А., Колоколов А. А.* Оценки среднего числа итераций для некоторых алгоритмов решения задачи об упаковке множества // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2010. — Т. 50, № 2. — С. 242–248.

[4] *Заозерская Л. А., Колоколов А. А.* Оценки среднего числа итераций для некоторых алгоритмов решения задачи о рюкзаке // Труды VIII Международной конференции «Дискретные модели в теории управляющих систем», М.: МГУ, 2009. — С. 101–106.

[5] *Колоколов А. А.* Регулярные разбиения и отсечения в целочисленном программировании // Сибирский журнал исследования операций. — 1994. — Т. 1, № 2. — С. 18–39.

[6] *Кузюрин Н. Н.* Полиномиальный в среднем алгоритм в целочисленном линейном программировании // Сибирский журнал исследования операций. — 1994. — Т. 1, № 3. — С. 38–48.

[7] *Кузюрин Н. Н., Фомин С. А.* Эффективные алгоритмы и сложность вычислений. — 2008. `http://discopal.ispras.ru/ru.book-advanced-algorithms.htm`.

[8] *Nemhauser G. L., Wolsey L. A.* Integer and combinatorial optimization. — John Wiley & Sons, inc.: Wiley-Intersci. Publ., 1999.

NP-полнота некоторых задач анализа данных*

Кельманов А. В.
kelm@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет

Доказана NP-полнота дискретных оптимизационных задач, к которым сводятся некоторые актуальные проблемы, возникающие в рамках анализа данных при поиске подмножеств векторов.

NP-completeness of some data analysis problems*

Kel'manov A. V.
Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

Some important problems in data analysis are reduced to the special optimization problems of vector subsets choice. The NP-completeness of these problems is proved.

Объект исследования работы — проблемы оптимизации в задачах компьютерного анализа данных. Предмет исследования — дискретные экстремальные задачи, к которым сводятся некоторые варианты проблемы поиска подмножеств во множестве векторов евклидова пространства. Цель работы — исследование сложности этих задач.

Как известно, конструктивная модель какой-либо содержательной проблемы анализа данных формулируется в форме задачи оптимизации подходящего критерия или функционала (максимума правдоподобия, минимума суммы квадратов уклонений, максимума апостериорной вероятности и т.п.), адекватно отражающего эту проблему. Оптимизация этого критерия в комбинации с многообразием объективно существующих структур (моделей) анализируемых данных порождает разнообразие редуцированных экстремальных задач, к которым сводится поиск оптимального решения. При этом сходные в содержательном плане проблемы сводятся к отличающимся экстремальным задачам. Зачастую простейшие и давно известные проблемы анализа данных сводятся к решению экстремальных задач, статус сложности которых неизвестен. Некторые из таких проблем анализируется в настоящей работе.

В известной NP-трудной [1–4] задаче MSSC (Minimum-Sum-of-Squares Clustering) — кластеризации по критерию минимума суммы квадратов расстояний от элементов кластеров до их центров — требуется разбить множество векторов евклидова пространства на подмножества (кластеры), включающие «близкие» или «похожие» по указанному критерию векторы. Центр кластера в этой задаче определяется как среднее значение вектора в кластере. Поэтому в некоторых публикациях эта задача фигурирует под названием k-Means (k-средних), которое соответствует названию одного из ранних алгоритмов [5], предложенных для ее решения.

К другим NP-трудным задачам [6–10], сводятся задачи поиска во множестве векторов евклидова пространства семейства непересекающихся подмножеств, включающих «близкие» между собой векторы. При постановке этих задач используется тот же критерий, что и при формулировке задачи MSSC. Однако, в отличие от задачи MSSC, предполагается, что объединение элементов из искомого семейства может не совпадать с исходным множеством. При этом подмножество, дополняющее объединение семейства искомых подмножеств до всего множества, может быть как пустым, так и содержащим некоторые векторы, не входящие в искомое семейство.

В данной работе анализируются сходные в содержательном плане задачи. В этих задачах наряду с поиском семейства подмножеств, включающих «близкие» между собой векторы, требуется найти еще и семейство таких подмножеств векторов, что элементы каждого из подмножеств этого семейства «похожи» на вектор из заданного множества (алфавита) векторов. Предполагается, что объединение подмножеств из искомого семейства как и в задачах, рассмотренных в [6–10], может не покрывать исходное множество.

Перечисленные задачи актуальны в широком спектре приложений (см., например, [1-6], [11–13] и цитированные там работы), связанных компьютерным анализом массивов зашумленных данных (матриц, последовательностей, временных рядов, сигналов), включающих повторяющиеся, чередующиеся или перемежающиеся информационно значимые векторы (или фрагменты одинаковой размерности), в случае, когда места расположения этих векторов (фрагментов) в массиве неизвестны.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (проекты № 09-01-00032, № 10-07-00195), целевой программы АВЦП Рособразования (проект № 2.1.1/3235), целевой программы № 2 Президиума РАН (проект № 227), а также целевой программы СО РАН (интеграционный проект № 44).

Одна из возможных содержательных трактовок рассматриваемой ниже проблемы анализа данных состоит в следующем. Имеется совокупность, включающая несколько результатов измерения набора (вектора) каких-либо характеристик для каждого элемента из некоторого множества материальных объектов. Каждый объект этого множества может находиться в двух состояниях: активном и пассивном. В пассивном состоянии значения всех измеряемых характеристик из набора равны нулю, а в активном — значение хотя бы одной характеристики не равно нулю. Для активных состояний одной части объектов из множества известен алфавит эталонных наборов значений всех характеристик. Для активных состояний другой — оставшейся — части объектов этого множества аналогичные данные отсутствуют (неизвестны). В каждом результате измерения имеется ошибка, причем соответствие между объектом и результатом измерения его характеристик неизвестно. Требуется, используя адекватный измеряемым характеристикам критерий, найти семейство подмножеств наборов, соответствующих активному состоянию каждого объекта из множества (или найти подмножества «похожих» объектов) и оценить неизвестные характеристики для части объектов в активном состоянии.

В настоящей работе показано, что экстремальные задачи, к которым сводятся возможные варианты сформулированной содержательной проблемы, относятся к классу труднорешаемых задач.

Модель анализа данных

Рассмотрим следующую структуру данных. Пусть векторная последовательность $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^q$, $n \in \mathcal{N}$, где $\mathcal{N} = \{1, \ldots, N\}$, обладает свойством

$$\boldsymbol{x}_n = \begin{cases} \boldsymbol{w}_k, & n \in \mathcal{M}_k, \quad k = 1, \ldots, K; \\ \boldsymbol{v}_j, & n \in \mathcal{N}_j, \quad j = 1, \ldots, J; \\ \boldsymbol{0}, & n \in \mathcal{N} \setminus \Big\{ \Big(\bigcup\limits_{k=1}^{K} \mathcal{M}_k \Big) \cup \Big(\bigcup\limits_{j=1}^{J} \mathcal{N}_J \Big) \Big\}, \end{cases} \tag{1}$$

где $\mathcal{M}_1 \cup \ldots \cup \mathcal{M}_K \cup \mathcal{N}_1 \cup \ldots \cup \mathcal{N}_J \subseteq \mathcal{N}$, причем все множества из семейства $\{\mathcal{M}_1, \ldots, \mathcal{M}_K, \mathcal{N}_1, \ldots, \mathcal{N}_J\}$ не пусты и не пересекаются, а среди векторов из множеств $\{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_K\}$ и $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_J\}$ нет ни одного нулевого вектора.

Допустим, что для обработки доступна последовательность

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{x}_n + \boldsymbol{e}_n, \; n \in \mathcal{N}, \tag{2}$$

где $\boldsymbol{e}_n$ — вектор помехи (ошибки), независимый от вектора $\boldsymbol{x}_n$. Учитывая зависимость элементов последовательности (1) от множеств, положим

$$S(\mathcal{M}_1, \ldots, \mathcal{M}_K, \mathcal{N}_1, \ldots, \mathcal{N}_J, \boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_K, \boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_J) = \sum_{n \in \mathcal{N}} \|\boldsymbol{y}_n - \boldsymbol{x}_n\|^2 \tag{3}$$

и рассмотрим модель анализа данных в виде следующей оптимизационной задачи.

Дано: последовательность $\boldsymbol{y}_n$, $n \in \mathcal{N}$, и алфавит $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_J\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$. *Найти*: семейство $\{\mathcal{M}_1, \ldots, \mathcal{M}_K, \mathcal{N}_1, \ldots, \mathcal{N}_J\}$ непустых непересекающихся подмножеств множества $\mathcal{N}$ и совокупность $\{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_K\}$ векторов, минимизирующих $S(\mathcal{M}_1, \ldots, \mathcal{M}_K, \mathcal{N}_1, \ldots, \mathcal{N}_J, \boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_K \,|\, \boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_J)$, при условии, что структура последовательности описывается формулами (1) и (2).

Эта задача соответствует сформулированной во введении содержательной проблеме поиска семейства непустых непересекающихся подмножеств. В модели анализа данных ненулевые векторы из множества $\{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_K\}$ и алфавита $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_J\}$ можно интерпретировать как информационно значимые векторы, компоненты которых соответствуют измеряемым характеристикам объектов в активном состоянии, причем векторы $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_J$ из алфавита известны, а векторы $\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_K$ неизвестны. Мощности подмножеств $\mathcal{M}_k$, $k = 1, \ldots, K$, и $\mathcal{N}_j$, $j = 1, \ldots, J$, соответствуют числу активных состояний этих объектов.

Оптимизационную задачу можно трактовать, как поиск наилучшего варианта приближения по критерию минимума суммы квадратов уклонений последовательности (2) от последовательности (1), которая включает повторяющиеся ненулевые векторы, перемежающиеся с нуль-вектором. Нетрудно установить, что к аналогичной формулировке можно прийти, если считать, что вектор $\boldsymbol{e}_n$ есть выборка единичного объема из q-мерного нормального распределения с параметрами $(\boldsymbol{0}, \sigma^2 \boldsymbol{I})$, где $\boldsymbol{I}$ — единичная матрица, а в качестве критерия решения использовать традиционный для статистики максимум функционала правдоподобия.

Рассмотрим возможные варианты редуцированных задач, к которым сводится эта задача анализа данных.

Редуцированные задачи

Раскрывая сумму квадратов в правой части (3) с учетом (1), получим

$$S = \sum_{n \in \mathcal{N}} \|\boldsymbol{y}_n\|^2 - \sum_{k=1}^{K} \sum_{i \in \mathcal{M}_k} \big\{ 2(\boldsymbol{y}_i, \boldsymbol{w}_k) - \|\boldsymbol{w}_k\|^2 \big\} - \sum_{j=1}^{J} \sum_{i \in \mathcal{N}_j} \big\{ 2(\boldsymbol{y}_i, \boldsymbol{v}_j) - \|\boldsymbol{v}_j\|^2 \big\}. \tag{4}$$

Минимум функционала $S(\cdot)$ по неизвестным векторам $\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_K$ находится аналитически. Используя (4), нетрудно убедиться, что для любых непустых непересекающихся подмножеств $\mathcal{M}_1 \subset \mathcal{N}, \ldots, \mathcal{M}_K \subset \mathcal{N}$ этот минимум доставляется векторами $\bar{\boldsymbol{w}}_k = \frac{1}{|\mathcal{M}_k|} \sum\limits_{i \in \mathcal{M}_k} \boldsymbol{y}_i$, $k = 1, \ldots, K$,

и равен

$$S_{\min}(\mathcal{M}_1,\dots,\mathcal{M}_K,\mathcal{N}_1,\dots,\mathcal{N}_J \,|\, \boldsymbol{v}_1,\dots,\boldsymbol{v}_J) = \\ = \sum_{n\in\mathcal{N}} \|\boldsymbol{y}_n\|^2 - \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|\mathcal{M}_k|} \Big\| \sum_{i\in\mathcal{M}_k} \boldsymbol{y}_i \Big\|^2 - \\ - \sum_{j=1}^{J} \sum_{i\in\mathcal{N}_j} \big\{ 2(\boldsymbol{y}_i,\boldsymbol{v}_j) - \|\boldsymbol{v}_j\|^2 \big\}. \qquad (5)$$

Заметим, что первый член в правой части этого равенства является константой. Следовательно, задача минимизации функционала $S(\cdot)$, сформулированная выше, сводится к максимизации суммы двух последних членов в правой части выражения (5). Кроме того, заметим, что мощности искомых подмножеств $\mathcal{M}_k$, $k = 1,\dots,K$, и $\mathcal{N}_j$, $j = 1,\dots,J$, могут быть как фиксированными (известными), так и нефиксированными (неизвестными или оптимизируемыми) величинами. Поэтому возможно четыре варианта задачи. Наконец, заметим, что $\sum\limits_{j=1}^{J} \sum\limits_{i\in\mathcal{N}_j} \|\boldsymbol{v}_j\|^2 = \sum\limits_{j=1}^{J} |\mathcal{N}_j| \cdot \|\boldsymbol{v}_j\|^2$. Следовательно, эта сумма, входящая в последний член правой части равенства (5), также является константой в случае, когда мощности множеств $\mathcal{N}_j$, $j = 1,\dots,J$, фиксированы.

Положим $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_n \,|\, n \in \mathcal{N}\}$, $\mathcal{C} = \{\boldsymbol{y}_j \,|\, j \in \mathcal{M}\}$. Заменив в выражении (5) суммирование по индексам на суммирование по элементам множеств, с учетом сделанных замечаний получим четыре редуцированные экстремальные задачи.

Перед формулировкой задач поясним их краткие символьные обозначения, введенные ниже. Первые три символа — SVS — одинаковы во всех кратких названиях задач и образованы от английского словосочетания Search for Vector Subsets. Вторые два символа образованы от слов Fixed и Nonfixed для обозначения четырех комбинаций — FF, NF, FN и NN, соответствующих возможным вариантам, которые индуцируются наличием или отсутствием ограничений на мощности множеств из пары совокупностей $\{\mathcal{M}_1,\dots,\mathcal{M}_K\}$ и $\{\mathcal{N}_1,\dots,\mathcal{N}_J\}$ на входе задачи. Сформулируем редуцированные задачи в форме верификации свойств.

Задача SVS-FF.

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1,\dots,\boldsymbol{y}_N\}$ и алфавит $\{\boldsymbol{v}_1,\dots,\boldsymbol{v}_J\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, натуральные числа $M_1,\dots,M_K$, $N_1,\dots,N_J$ и положительное число A.

Вопрос: существуют ли такие непустые непересекающиеся подмножества $\mathcal{Y}_k^1 \subset \mathcal{Y}$, $k = 1,\dots,K$, и $\mathcal{Y}_j^2 \subset \mathcal{Y}$, $j = 1,\dots,J$, что имеет место неравенство

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{1}{M_k} \Big\| \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}_k^1} \boldsymbol{y} \Big\|^2 + 2 \sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}_j^2} (\boldsymbol{y},\boldsymbol{v}_j) \geqslant A,$$

при ограничениях $|\mathcal{Y}_k^1| = M_k$, $k = 1,\dots,K$, и $|\mathcal{Y}_j^2| = N_j$, $j = 1,\dots,J$, на мощности подмножеств?

Задача SVS-NF.

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1,\dots,\boldsymbol{y}_N\}$ и алфавит $\{\boldsymbol{v}_1,\dots,\boldsymbol{v}_J\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, натуральные числа $N_1,\dots,N_J$ и положительное число A.

Вопрос: существуют ли такие непустые непересекающиеся подмножества $\mathcal{Y}_k^1 \subset \mathcal{Y}$, $k = 1,\dots,K$, и $\mathcal{Y}_j^2 \subset \mathcal{Y}$, $j = 1,\dots,J$, что имеет место неравенство

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|\mathcal{Y}_k^1|} \Big\| \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}_k^1} \boldsymbol{y} \Big\|^2 + 2 \sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}_j^2} (\boldsymbol{y},\boldsymbol{v}_j) \geqslant A,$$

при ограничениях $|\mathcal{Y}_j^2| = N_j$, $j = 1,\dots,J$?

Задача SVS-FN.

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1,\dots,\boldsymbol{y}_N\}$ и алфавит $\{\boldsymbol{v}_1,\dots,\boldsymbol{v}_J\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, натуральные числа $M_1,\dots,M_K$ и положительное число A.

Вопрос: существуют ли такие непустые непересекающиеся подмножества $\mathcal{Y}_k^1 \subset \mathcal{Y}$, $k = 1,\dots,K$, и $\mathcal{Y}_j^2 \subset \mathcal{Y}$, $j = 1,\dots,J$, что имеет место неравенство

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{1}{M_k} \Big\| \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}_k^1} \boldsymbol{y} \Big\|^2 + \sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}_j^2} \big\{ 2(\boldsymbol{y},\boldsymbol{v}_j) - \|\boldsymbol{v}_j\|^2 \big\} \geqslant A,$$

при ограничениях $|\mathcal{Y}_k^1| = M_k$, $k = 1,\dots,K$?

Задача SVS-NN.

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1,\dots,\boldsymbol{y}_N\}$ и алфавит $\{\boldsymbol{v}_1,\dots,\boldsymbol{v}_J\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, положительное число A.

Вопрос: существуют ли такие непустые непересекающиеся подмножества $\mathcal{Y}_k^1 \subset \mathcal{Y}$, $k = 1,\dots,K$, и $\mathcal{Y}_j^2 \subset \mathcal{Y}$, $j = 1,\dots,J$, что имеет место неравенство

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|\mathcal{Y}_k^1|} \Big\| \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}_k^1} \boldsymbol{y} \Big\|^2 + \sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}_j^2} \big\{ 2(\boldsymbol{y},\boldsymbol{v}_j) - \|\boldsymbol{v}_j\|^2 \big\} \geqslant A?$$

Основным результатом настоящей работы является установление статуса NP-полноты сформулированных выше задач.

Анализ сложности

Сформулируем следующие вспомогательные NP-полные [10] задачи.

Задача SSAF.

Дано: множество $\mathcal{U} = \{\boldsymbol{u}_1,\dots,\boldsymbol{u}_L\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, натуральные числа $I_1,\dots,I_K$ и положительное число B.

Вопрос: существует ли такое семейство $\{\mathcal{U}_1,\dots,\mathcal{U}_K\}$ непустых непересекающихся подмножеств множества $\mathcal{U}$, что имеет место неравенство

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{1}{I_k} \Big\| \sum_{\boldsymbol{u}\in\mathcal{U}_k} \boldsymbol{u} \Big\|^2 \geqslant B,$$

при ограничениях $|\mathcal{U}_k| = I_k$, $k = 1,\dots,K$, на мощности подмножеств?

Задача SSANF.

Дано: множество $\mathcal{U} = \{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_L\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$ и положительное число B.

Вопрос: существует ли такое семейство $\{\mathcal{U}_1, \ldots, \mathcal{U}_K\}$ непустых непересекающихся подмножеств множества $\mathcal{U}$, что имеет место неравенство

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{1}{|\mathcal{U}_k|} \Big\| \sum_{\boldsymbol{u} \in \mathcal{U}_k} \boldsymbol{u} \Big\|^2 \geqslant B?$$

Напомним, что к задачам SSAF и SSANF сводится поиск во множестве векторов евклидова пространства семейства таких подмножеств векторов, что элементы этих подмножеств «похожи» между собой по критерию минимума суммы квадратов расстояний, в случаях, когда мощности искомых подмножеств известны и неизвестны соответственно [10].

Справедливость следующих теорем установлена [15] путем полиномиального сведения задач SSAF и SSANF к редуцированным задачам.

Теорема 1. *Задача SVS-FF* NP*-полна.*

Теорема 2. *Задача SVS-NF* NP*-полна.*

Теорема 3. *Задача SVS-FN* NP*-полна.*

Теорема 4. *Задача SVS-NN* NP*-полна.*

Заключение

Показана труднорешаемость оптимизационных задач, к которым сводится поиск по критерию минимума суммы квадратов расстояний во множестве векторов евклидова пространства таких двух семейств непустых непересекающихся подмножеств, что одно из этих семейств включает совокупность подмножеств, каждое из которых содержит «близкие» между собой векторы, а другое — совокупность подмножеств векторов, каждое из которых содержит элементы, «похожие» на вектор из заданного алфавита. Из полученного результата следует труднорешаемость соответствующих задач анализа данных. Остается заметить, что эффективные алгоритмы с гарантированными оценками точности для решения рассмотренных задач на сегодняшний день неизвестны.

Литература

[1] *Aloise D., Deshpande A., Hansen P., Popat P.* NP-Hardness of Euclidean Sum-of-Squares Clustering // Les Cahiers du GERAD, G-2008-33, 2008. — 4 p.

[2] *Dasgupta S.* The Hardness of k-means Clustering // Technical Report CS-2007-0890. University of California, 2007. — 6 p.

[3] *Mahajan M., Nimbhorkar P., Varadarajan K.* The Planar k-means Problem is NP-Hard // Lecture Notes in Computer Science. — 2009. — Vol. 5431. — Pp. 284–285.

[4] *Долгушев А. В., Кельманов А. В.* К вопросу об алгоритмической сложности одной задачи кластерного анализа // Дискретный анализ и исследование операций. — 2010. — Т. 17, № 2. — С. 39–45.

[5] *MacQueen J. B.* Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations // Proc. 5-th Berkeley Symp. of Mathematical Statistics and Probability. — 1967. — Vol. 1. — Pp. 281–297.

[6] *Гимади Э. Х., Кельманов А. В., Кельманова М. А., Хамидуллин С. А.* Апостериорное обнаружение в числовой последовательности квазипериодического фрагмента при заданном числе повторов // Сиб. журн. индустр. математики. — 2006. — Т. 9, № 1(25). — С. 55–74.

[7] *Бабурин А. Е., Гимади Э. Х., Глебов Н. И., Пяткин А. В.* Задача отыскания подмножества векторов с максимальным суммарным весом // Дискретный анализ и исследование операций. Сер. 2. — 2007. — Т. 14, № 1. — С. 32–42.

[8] *Кельманов А. В., Пяткин А. В.* О сложности одного из вариантов задачи выбора подмножества «похожих» векторов // Докл. РАН. — 2008. — Т. 421, № 5. — С. 590–592.

[9] *Кельманов А. В., Пяткин А. В.* Об одном варианте задачи выбора подмножества векторов // Дискретный анализ и исследование операций. — 2008. — Т. 15, № 5. — С. 25–40.

[10] *Кельманов А. В., Пяткин А. В.* О сложности некоторых задач поиска подмножеств векторов и кластерного анализа // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 2009. — Т. 49, № 11. — С. 2059–2067.

[11] *Aloise D., Hansen P.* On the Complexity of Minimum Sum-of-Squares Clustering // Les Cahiers du GERAD, G-2007-50, 2007. — 12 p.

[12] *Kel'manov A. V., Jeon B.* A Posteriori Joint Detection and Discrimination of Pulses in a Quasiperiodic Pulse Train // IEEE Transactions on Signal Processing. — 2004. — Vol. 52, No. 3. — Pp. 1–12.

[13] *Кельманов А. В.* Проблема off-line обнаружения квазипериодически повторяющегося фрагмента в числовой последовательности // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. — 2008. — Т. 14, № 2. — С. 81–88.

[14] *Кельманов А. В., Михайлова Л. В., Хамидуллин С. А.* Апостериорное обнаружение в квазипериодической последовательности повторяющегося набора эталонных фрагментов // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 2008. — Т. 48, № 12. — С. 168–184.

[15] *Кельманов А. В.* NP-полнота некоторых задач поиска подмножеств векторов // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. — 2010. — Т. 16, № 3. — (принята в печать).

NP-полнота некоторых задач выбора подмножества векторов*

Кельманов А. В., Пяткин А. В.
kelm@math.nsc.ru, artem@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет

Доказана NP-полнота некоторых задач выбора подмножества векторов евклидова пространства. К решению этих задач сводится одна из проблем анализа данных. Предполагается, что искомое подмножество имеет фиксированную мощность и включает векторы «близкие» между собой по критерию минимума суммы квадратов расстояний.

NP-completeness of some problems of a vectors subset choice*

Kel'manov A. V., Pyatkin A. V.
Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

One problem in data analysis is reduced to the problems of a vectors subset choice. The NP-completeness of these problems is proved. These problems are connected with searching a vector subset in a given set in Euclidian space under following conditions. The first condition is that the required subset has a given cardinality, and the second one is that this subset includes vectors which are close to each other under the criterion of minimum sum of squared distances.

Объект исследования работы — проблемы оптимизации в задачах компьютерного анализа данных. Предмет исследования — дискретные оптимизационные задачи, к которым сводится одна из проблем поиска подмножества векторов евклидова пространства. Цель работы — анализ статуса алгоритмической сложности этих задач.

В работах [1–5] установлена NP-полнота оптимизационных задач, к которым сводится один из вариантов проблемы выбора во множестве векторов евклидова пространства подмножества векторов, включающего «близкие» (по критерию минимума суммы квадратов расстояний) между собой векторы. При постановке этих задач рассматривалась модель анализа данных, в которой предполагалось, что анализируемое множество векторов наряду с «близкими» векторами может содержать векторы «похожие» на центрированный около нуля шум.

В данной работе анализируется сходная в содержательном плане проблема анализа данных, связанная с поиском подмножества векторов. Однако, оптимизационные задачи, к которым сводится эта проблема, отличны как от задач, рассмотренных в [1–5], так и от известной NP-полной [6–9] задачи MSSC (Minimum-Sum-of-Squares Clustering) — кластеризации векторов евклидова пространства по критерию минимума суммы квадратов расстояний, которая известна также под названием k-means [7], [10]. Суть анализируемой проблемы состоит в следующем.

Имеется таблица, содержащая результаты измерения набора информационно значимых характеристик для совокупности некоторых материальных объектов. Часть объектов из этой совокупности идентичны и имеют одинаковые характеристики. Число идентичных объектов известно. Оставшиеся объекты различны и имеют отличающиеся характеристики. В каждом результате измерения, представленном в таблице, имеется ошибка, причем соответствие между объектом и набором неизвестно. Требуется найти подмножество наборов, соответствующих идентичным объектам и оценить по результатам измерения набор характеристик этих объектов (учитывая, что данные содержат ошибку измерения).

В настоящей работе установлено, что оптимизационные задачи, к которым сводится рассматриваемая проблема, относятся к классу труднорешаемых задач.

Модель анализа данных

Рассмотрим следующую структуру данных, представленных в виде совокупности векторов евклидова пространства. Пусть векторная последовательность $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^q$, $n \in \mathcal{N}$, где $\mathcal{N} = \{1, \ldots, N\}$, обладает свойством

$$\boldsymbol{x}_n = \begin{cases} \boldsymbol{w}, & n \in \mathcal{M}, \\ \boldsymbol{v}_n, & n \in \mathcal{N} \backslash \mathcal{M}, \end{cases} \qquad (1)$$

где $\mathcal{M} \subset \mathcal{N}$, $\mathcal{M} \neq \varnothing$.

Допустим, что для обработки доступна последовательность

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{x}_n + \boldsymbol{e}_n, \ n \in \mathcal{N}, \qquad (2)$$

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (проекты № 09-01-00032, № 10-07-00195), целевой программы АВЦП Рособразования (проект № 2.1.1/3235), целевой программы № 2 Президиума РАН (проект № 227), целевой программы СО РАН (интеграционный проект № 44), а также гранта EPSRC (проект EP/F064551/1).

где $\boldsymbol{e}_n$ — вектор помехи (ошибки), независимый от вектора $\boldsymbol{x}_n$. Учитывая зависимость элементов последовательности (1) от множеств, положим

$$S(\mathcal{M}, \boldsymbol{w}, \{\boldsymbol{v}_i, i \in \mathcal{N}\backslash\mathcal{M}\}) = \sum_{n\in\mathcal{N}} \|\boldsymbol{y}_n - \boldsymbol{x}_n\|^2 \quad (3)$$

и рассмотрим модель анализа данных в виде следующей экстремальной задачи.

Дано: последовательность $\boldsymbol{y}_n$, $n \in \mathcal{N}$, векторов из $\mathbb{R}^q$ и натуральное число $M > 1$.

Найти: непустое подмножество $\mathcal{M} \subset \mathcal{N}$, вектор $\boldsymbol{w}$ и совокупность $\{\boldsymbol{v}_i,\ i \in \mathcal{N}\backslash\mathcal{M}\}$ векторов, минимизирующих $S(\cdot)$, при ограничении $|\mathcal{M}| = M$ на мощность подмножества $\mathcal{M}$ и при условии, что структура последовательности описывается формулами (1) и (2).

Эта задача соответствует сформулированной выше содержательной проблеме, возникающей в разнообразных приложениях. В модели анализа данных вектор $\boldsymbol{w}$ можно интерпретировать как набор искомых характеристик идентичных объектов, а векторы $\boldsymbol{v}_i,\ i \in \mathcal{N}\backslash\mathcal{M}$, — как наборы характеристик остальных объектов совокупности. Мощность подмножества $\mathcal{M}$ соответствуют числу идентичных объектов.

Оптимизационную задачу можно трактовать, как поиск наилучшего варианта приближения по критерию минимума суммы квадратов уклонений последовательности (2) от последовательности (1), которая включает повторяющийся вектор, перемежающийся с произвольными векторами евклидова пространства. Нетрудно установить, что к минимизации функционала (3) приводит статистическая формулировка проблемы, если считать, что вектор $\boldsymbol{e}_n$ есть выборка единичного объема из q-мерного нормального распределения с параметрами $(\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{I})$, где $\boldsymbol{I}$ — единичная матрица, а в качестве критерия решения использовать максимум функционала правдоподобия.

Проанализируем возможные варианты редуцированных задач, к которым сводится сформулированная задача анализа данных.

Задачи выбора подмножества

Раскрывая сумму квадратов в правой части (3) с учетом (1), получим

$$S = \sum_{n\in\mathcal{N}} \|\boldsymbol{y}_n\|^2 - \sum_{j\in\mathcal{M}} \big\{2(\boldsymbol{y}_j, \boldsymbol{w}) - \|\boldsymbol{w}\|^2\big\} - \\ - \sum_{i\in\mathcal{N}\backslash\mathcal{M}} \big\{2(\boldsymbol{y}_i, \boldsymbol{v}_i) - \|\boldsymbol{v}_i\|^2\big\}. \quad (4)$$

Минимум функционала $S(\cdot)$ по неизвестным векторам $\boldsymbol{w}$ и $\boldsymbol{v}_i$, $i \in \mathcal{N}\backslash\mathcal{M}$, находится аналитически. Используя (4), нетрудно убедиться, что для любого непустого подмножества $\mathcal{M} \subset \mathcal{N}$ этот минимум доставляется векторами $\bar{\boldsymbol{w}} = \frac{1}{|\mathcal{M}|}\sum\limits_{i\in\mathcal{M}} \boldsymbol{y}_i$ и $\bar{\boldsymbol{v}}_j = \boldsymbol{y}_j$, $j \in \mathcal{N}\backslash\mathcal{M}$, и равен

$$S_{\min}(\mathcal{M}) = \sum_{n\in\mathcal{N}} \|\boldsymbol{y}_n\|^2 - \\ - \Big(\frac{1}{|\mathcal{M}|}\Big\|\sum_{i\in\mathcal{M}} \boldsymbol{y}_i\Big\|^2 + \sum_{j\in\mathcal{N}\backslash\mathcal{M}} \|\boldsymbol{y}_j\|^2\Big). \quad (5)$$

Заметим, что первый член в правой части этого равенства является константой. Следовательно, задача минимизации функционала $S(\cdot)$, сформулированная выше, сводится к максимизации выражения в скобках в правой части (5).

Положим $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_n \,|\, n \in \mathcal{N}\}$, $\mathcal{C} = \{\boldsymbol{y}_j \,|\, j \in \mathcal{M}\}$ и заменим в выражении (5) суммирование по индексам на суммирование по элементам множеств. С учетом сделанного замечания получим редуцированную оптимизационную задачу, которая в форме верификации свойств формулируется следующим образом.

Задача VS-1 (Vector Subset 1).

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, натуральное число $M > 1$ и положительное число A.

Вопрос: существует ли такое подмножество $\mathcal{C} \subset \mathcal{Y}$, что имеет место неравенство

$$\frac{1}{M}\Big\|\sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \boldsymbol{y}\Big\|^2 + \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}\backslash\mathcal{C}} \|\boldsymbol{y}\|^2 \geqslant A, \quad (6)$$

при ограничении $|\mathcal{C}| = M$ на мощность подмножества $\mathcal{C}$?

Кроме того, заметим, что для правой части (5) в терминах суммирования по элементам множеств справедлива цепочка равенств

$$\sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}} \|\boldsymbol{y}\|^2 - \frac{1}{|\mathcal{C}|}\Big\|\sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \boldsymbol{y}\Big\|^2 - \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{Y}\backslash\mathcal{C}} \|\boldsymbol{y}\|^2 = \\ = \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \|\boldsymbol{y}\|^2 - \frac{1}{|\mathcal{C}|}\Big\|\sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \boldsymbol{y}\Big\|^2 = \\ = \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \|\boldsymbol{y}\|^2 - \frac{2}{|\mathcal{C}|}\sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}}\Big(\boldsymbol{y}, \sum_{\boldsymbol{u}\in\mathcal{C}} \boldsymbol{u}\Big) + \frac{1}{|\mathcal{C}|}\Big\|\sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \boldsymbol{y}\Big\|^2 = \\ = \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \|\boldsymbol{y}\|^2 - 2\sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} (\boldsymbol{y}, \bar{\boldsymbol{w}}) + |\mathcal{C}|\|\bar{\boldsymbol{w}}\|^2 = \\ = \sum_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \|\boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{w}}\|^2, \quad (7)$$

где $\bar{\boldsymbol{w}} = \frac{1}{|\mathcal{C}|}\sum\limits_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{C}} \boldsymbol{y}$. Поэтому минимизация функционала $S(\cdot)$ сводится к минимизации правой части (7). Отсюда получаем следующую задачу выбора подмножества.

Задача VS-2 (Vector Subset 2).

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, натуральное число $M > 1$ и положительное число B.

Вопрос: существует ли такое подмножество $\mathcal{C} \subset \mathcal{Y}$, что имеет место неравенство

$$\sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}} \left\| \boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{w}} \right\|^2 \leqslant B, \qquad (8)$$

где $\bar{\boldsymbol{w}} = \frac{1}{|\mathcal{C}|} \sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}} \boldsymbol{y}$, при ограничении $|\mathcal{C}| = M$ на мощность подмножества $\mathcal{C}$?

Наконец, заметим, что для любого множества $\mathcal{Z}$ векторов евклидова пространства имеет место равенство [11]

$$\sum_{\boldsymbol{z} \in \mathcal{Z}} \left\| \boldsymbol{z} - \bar{\boldsymbol{z}}(\mathcal{Z}) \right\|^2 = \frac{1}{2|\mathcal{Z}|} \sum_{\boldsymbol{z} \in \mathcal{Z}} \sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{Z}} \|\boldsymbol{z} - \boldsymbol{y}\|^2, \qquad (9)$$

где $\bar{\boldsymbol{z}}(\mathcal{Z}) = \frac{1}{|\mathcal{Z}|} \sum\limits_{\boldsymbol{z} \in \mathcal{Z}} \boldsymbol{z}$.

Учитывая, что мощность подмножества $\mathcal{C}$ фиксирована, из (7) и (9) получим еще одну задачу выбора подмножества.

Задача VS-3 (Vector Subset 3).

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, натуральное число $M > 1$ и положительное число D.

Вопрос: существует ли такое подмножество $\mathcal{C} \subset \mathcal{Y}$, что имеет место неравенство

$$\sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}} \sum_{\boldsymbol{z} \in \mathcal{C}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{z}\|^2 \leqslant D, \qquad (10)$$

при ограничении $|\mathcal{C}| = M$ на мощность подмножества $\mathcal{C}$?

Основным результатом настоящей работы является установление статуса NP-полноты сформулированных выше задач.

Анализ сложности

Напомним следующую вспомогательную NP-полную [12] задачу.

Задача Клика.

Дано: граф G и натуральное число M.

Вопрос: существует ли в этом графе такое подмножество вершин мощности M, что любые две вершины из этого подмножества связаны ребром?

Специальный случай этой задачи для однородных графов нефиксированной степени d также относится к числу NP-полных задач [13]. Справедливость следующей теоремы установлена путем полиномиального сведения этой задачи к задаче VS-3.

Теорема 1. *Задача VS-3* NP*-полна в сильном смысле.*

Идея доказательства состоит в следующем. Пусть G — однородный граф степени d с N вершинами и q рёбрами. Построим следующий пример задачи VS-3. Каждой вершине графа G сопоставим q-мерный вектор $\boldsymbol{y}$, в котором i-я координата равна 1, если i-е ребро инцидентно этой вершине, и равна 0 — в противном случае. Тогда для пары векторов $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{z}$ из множества $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N\}$, очевидно, имеет место равенство $\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{z}\|^2 = 2d$, если соответствующие этим векторам вершины в графе G не смежны, и равенство $\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{z}\|^2 = 2d - 2$, если эти вершины смежны. Следовательно, целевая функция (10) задачи VS-3 не превосходит числа $D = 2(d-1)M(M-1)$ тогда и только тогда, когда граф G содержит клику на M вершинах.

NP-полнота задачи в сильном смысле следует из того, что при доказательстве NP-полная в сильном смысле задача Клика была сведена к частному случаю задачи VS-3 с бинарными векторами.

Теорема 2. *Задача VS-2* NP*-полна в сильном смысле.*

При доказательстве показана полиномиальная сводимость к задаче VS-2 NP-полной задачи VS-3. Действительно, из (9) легко видеть, что в задаче VS-3 подмножество векторов, удовлетворяющее неравенству (10), существует тогда и только тогда, когда в задаче VS-2 при $B = \frac{D}{2M}$ существует соответствующее подмножество векторов, удовлетворяющее неравенству (8).

Теорема 3. *Задача VS-1* NP*-полна в сильном смысле.*

При доказательстве установлена полиномиальная сводимость к задаче VS-1 NP-полной задачи VS-2. В самом деле, из (7) следует, что в задаче VS-2 подмножество векторов, удовлетворяющее неравенству (8), существует тогда и только тогда, когда в задаче VS-1 при $A = \sum\limits_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{Y}} \|\boldsymbol{y}\|^2 - B$ существует соответствующее подмножество векторов, удовлетворяющее неравенству (6).

Напомним задачу MSSC и покажем её связь с рассмотренными задачами.

Задача MSSC.

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$ и положительное число B.

Вопрос: существует ли такое разбиение множества $\mathcal{Y}$ на непустые подмножества (кластеры) $\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_J$, что имеет место неравенство

$$\sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}_j} \|\boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{w}}_j\|^2 \leqslant B, \qquad (11)$$

где $\bar{\boldsymbol{w}}_j = \frac{1}{|\mathcal{C}_j|} \sum\limits_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}_j} \boldsymbol{y}$, $j = 1, \ldots, J$, — центр j-го кластера?

Рассмотрим следующую модификацию этой задачи.

Задача MSSC-Case.

Дано: множество $\mathcal{Y} = \{\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N\}$ векторов из $\mathbb{R}^q$, натуральное число $M > 1$ и положительное число B.

Вопрос: существует ли такое разбиение множества $\mathcal{Y}$ на $J = N - M + 1$ непустых кластеров $\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_{N-M+1}$, что мощность одного из кластеров равна M и имеет место неравенство (11)?

Пусть, например, мощность кластера $\mathcal{C}_1$ равна M. Тогда из условий задачи следует, что мощность оставшихся $N - M$ кластеров равна 1. Поскольку центр кластера, имеющего мощность, равную 1, совпадает с единственным элементом — вектором из этого кластера, для целевой функции задачи MSSC-Case из (11) имеем

$$\sum_{j=1}^{J} \sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}_j} \|\boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{w}}_j\|^2 =$$

$$= \sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}_1} \|\boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{w}}_1\|^2 + \sum_{j=2}^{N-M} \sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}_j} \|\boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{w}}_j\|^2 =$$

$$= \sum_{\boldsymbol{y} \in \mathcal{C}_1} \|\boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{w}}_1\|^2.$$

Отсюда следует эквивалентность задач VS-2 и MSSC-Case. Поэтому расмотренную проблему анализа данных можно трактовать как одну из труднорешаемых проблем кластерного анализа.

Заключение

Показана NP-полнота оптимизационных задач, которые индуцируются проблемой поиска во множестве векторов евклидова пространства такого подмножества векторов, что оно имеет заданную (фиксированную) мощность и включает векторы «близкие» между собой по критерию минимума суммы квадратов расстояний. Из полученного результата следует труднорешаемость соответствующей проблемы анализа данных. Остается заметить, что эффективные алгоритмы с гарантированными оценками точности для решения рассмотренных задач в настоящее время неизвестны.

Литература

[1] *Гимади Э. Х., Кельманов А. В., Кельманова М. А., Хамидуллин С. А.* Апостериорное обнаружение в числовой последовательности квазипериодического фрагмента при заданном числе повторов // Сиб. журн. индустр. математики. — 2006. — Т. 9, № 1(25). — С. 55–74.

[2] *Бабурин А. Е., Гимади Э. Х., Глебов Н. И., Пяткин А. В.* Задача отыскания подмножества векторов с максимальным суммарным весом // Дискретный анализ и исследование операций. Сер. 2. — 2007. — Т. 14, № 1. — С. 32–42.

[3] *Кельманов А. В., Пяткин А. В.* О сложности одного из вариантов задачи выбора подмножества «похожих» векторов // Докл. РАН. — 2008. — Т. 421, № 5. — С. 590–592.

[4] *Кельманов А. В., Пяткин А. В.* Об одном варианте задачи выбора подмножества векторов // Дискретный анализ и исследование операций. — 2008. — Т. 15, № 5. — С. 25–40.

[5] *Кельманов А. В., Пяткин А. В.* О сложности некоторых задач поиска подмножеств векторов и кластерного анализа // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2009. — Т. 49, № 11. — С. 2059–2067.

[6] *Aloise D., Deshpande A., Hansen P., Popat P.* NP-Hardness of Euclidean Sum-of-Squares Clustering // Les Cahiers du GERAD, G-2008-33, 2008. — 4 p.

[7] *Dasgupta S.* The Hardness of k-means Clustering // Technical Report CS-2007-0890. University of California, 2007. — 6 p.

[8] *Mahajan M., Nimbhorkar P., Varadarajan K.* The Planar k-means Problem is NP-Hard // Lecture Notes in Computer Science. — 2009. — Vol. 5431. — Pp. 284–285.

[9] *Долгушев А. В., Кельманов А. В.* К вопросу об алгоритмической сложности одной задачи кластерного анализа // Дискретный анализ и исследование операций. — 2010. — Т. 17, № 2. — С. 39–45.

[10] *MacQueen J. B.* Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations // Proc. 5-th Berkeley Symp. of Mathematical Statistics and Probability. — 1967. — Vol. 1. — Pp. 281–297.

[11] *Edwards A. W. F., Cavalli-Sforza L. L.* A Method for Cluster Analysis // Biometrics. — 1965. — Vol. 21. — Pp. 362–375.

[12] *Garey M. R., Johnson D. S.* Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-completeness. — San Francisco: CA: Freeman, 1979. — 339 p.

[13] *Papadimitriou C. H.* Computational Complexity. — New-York: Addison-Wesley, 1994. — 523 P.

Об одной задаче обнаружения и идентификации векторных наборов в последовательности*

Кельманов А. В., Михайлова Л. В., Хамидуллин С. А.
kelm@math.nsc.ru, mikh@math.nsc.ru, kham@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет

Рассматривается дискретная экстремальная задача, к которой сводится один из вариантов проблемы помехоустойчивого обнаружения и идентификации в векторной последовательности наборов векторов как элементов из заданного семейства. Обоснован точный эффективный алгоритм решения редуцированной задачи, гарантирующий оптимальность решения как по критерию максимального правдоподобия (если аддитивная помеха является гауссовской последовательностью независимых одинаково распределенных случайных величин), так и по критерию минимума суммы квадратов уклонений.

On a problem of detection and identification of vector tuples in a sequence*

Kel'manov A. V., Mikhailova L. V., Khamidullin S. A.
Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of RAS, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

One problem of noiseproof detection and identification of vector tuples in a vector sequence as elements from a given family can be reduced to the special discrete optimization problem. In the paper we study this problem. The exact efficient algorithm for solution to the problem is proved. This algorithm guarantees optimality of the solution by the maximum likelihood criterion (if the additive noise is a Gaussian sequence of uniformly distributed random values) as well as by the minimum sum of deviation squares criterion.

Объект исследования настоящей работы — проблемы оптимизации в задачах анализа данных и распознавания образов. Предмет исследования — дискретная экстремальная задача, к которой сводится один из вариантов проблемы помехоустойчивого off-line обнаружения и идентификации в векторной последовательности упорядоченных наборов векторов из заданного семейства. Цель работы — обоснование алгоритма решения этой задачи.

Одна из возможных содержательных трактовок рассматриваемой задачи состоит в следующем. Некоторый материальный объект может находиться в одном пассивном и конечном множестве элементарных активных состояний. Из множества элементарных активных состояний объект формирует последовательность наборов, имеющих различную размерность. Каждый из этих наборов (комбинаций элементарных активных состояний), как единое целое, однозначно характеризует одно из возможных типичный поведений объекта и, поэтому, имеет информационную ценность. Между двумя последовательными элементарными активными состояниями допускаются пассивные состояния так, что интервал времени между этими активными состояниями ограничен снизу и сверху некоторыми константами. Совокупность наборов (типичных поведений объекта) конечна.

Для контроля за состоянием объекту сопоставлен вектор, компоненты которого — некоторые измеряемые числовые информационно важные характеристики. В пассивном состоянии объекта значения всех компонент этого вектора равны нулю, а в активном — значение хотя бы одной компоненты не равно нулю. Каждому элементарному активному состоянию соответствует вектор с уникальными значениями компонент.

Источник сообщений через канал связи с помехой передает информацию о типовых поведениях объекта в виде векторной последовательности. Семейство возможных наборов, соответствующих типовым поведениям объекта, известно, а переданная последовательность наборов неизвестна. На приемную сторону поступает искаженная шумом векторная последовательность. Требуется определить (обнаружить) моменты времени в которые объект находился в элементарных активных состояниях, разбить последовательность на участки с типичным поведением и идентифицировать эти участки как наборы из заданного семейства.

Оптимизационная задача, к которой сводится частный случай этой проблемы — помехоустойчивое обнаружение и идентификация векторов из заданного множества в последовательности — была изучена в [1, 2]. Этот частный случай содержательно отличается от задачи, рассматриваемой в настоящей работе, тем, что данные о возможном поведении объекта (или о его состоянии) передаются с помощью единственного вектора (т. е. размерность векторного набора фиксирована и равна 1). Другой частный случай рассматриваемой

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (проекты № 09-01-00032, № 10-07-00195), целевой программы АВЦП Рособразования (проект № 2.1.1/3235), целевой программы № 2 Президиума РАН (проект № 227), а также целевой программы СО РАН (интеграционный проект № 44).

проблемы — помехоустойчивое обнаружение повторяющегося упорядоченного набора векторов — исследовался в [3–5]. Этот случай соответствует ситуации, когда возможно лишь одно повторяющееся поведение объекта. Для редуцированных экстремальных задач в цитируемых работах были построены точные полиномиальные алгоритмы, гарантирующие оптимальность решения как по критерию максимального правдоподобия (в случае, когда помеха аддитивна и является гауссовской последовательностью независимых одинаково распределенных случайных величин), так и по критерию минимума суммы квадратов уклонений. В настоящей работе построен точный полиномиальный алгоритм для решения задачи, которая является обобщением упомянутых задач.

Постановка задачи

Рассмотрим следующую модель анализируемых данных. Допустим, что последовательность $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^q$, $n \in \mathcal{N} = \{1, \ldots, N\}$, порождена векторным набором $(\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_J)$, в котором $\boldsymbol{w}_j = (\boldsymbol{u}_1^j, \ldots, \boldsymbol{u}_{L_j}^j)$, $j = 1, \ldots J$, и имеет следующую структуру:

$$\boldsymbol{x}_n = \begin{cases} \boldsymbol{u}_i^j, & \text{если } n = n_{s_{j-1}+i}, \\ & j = 1, \ldots J-1,\ i = 1, \ldots, L_j; \\ \boldsymbol{u}_i^J, & \text{если } n = n_{s_{J-1}+i}, \\ & i = 1, \ldots, M - s_{J-1}; \\ 0, & \text{если } n \in \mathcal{N} \backslash \{n_1, \ldots, n_M\}, \end{cases} \quad (1)$$

где $s_0 = 0$, $s_j = \sum\limits_{k=1}^{j} L_k$, L_k — размерность k-го векторного набора, а элементы подмножества $\{n_1, \ldots, n_M\} \subseteq \mathcal{N}$ удовлетворяют ограничениям

$$1 \leqslant T_{\min} \leqslant n_m - n_{m-1} \leqslant T_{\max} \leqslant N - 1, \quad m = 2, \ldots, M, \quad (2)$$

где $T_{\min}$ и $T_{\max}$ — натуральные числа.

Определим совокупность

$$\mathcal{W} \subset \big\{\boldsymbol{w} \,|\, \boldsymbol{w} = (\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_L),\ \boldsymbol{u}_i \in \mathbb{R}^q, \ \|\boldsymbol{u}_i\| \neq 0,\ i = 1, \ldots, L,\ L \leqslant L_{\max}\big\}, \quad (3)$$

$|\mathcal{W}| = K$, векторных наборов. Предположим, что компонента $\boldsymbol{w}_j$, $j = 1, \ldots, J$, набора $(\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_J)$, порождающего последовательность (1), является элементом этой совокупности. Допустим, что для наблюдения доступна последовательность

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{x}_n + \boldsymbol{e}_n,\ n \in \mathcal{N}, \quad (4)$$

где $\boldsymbol{e}_n$ — вектор помехи (ошибки измерения), независимый от вектора $\boldsymbol{x}_n$.

Учитывая зависимость элементов последовательности (1) от наборов $(n_1, \ldots, n_M)$ и $(\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_J)$, положим

$$S(n_1, \ldots, n_M, \boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_J) = \sum_{n \in \mathcal{N}} \|\boldsymbol{y}_n - \boldsymbol{x}_n\|^2, \quad (5)$$

где $\|\cdot\|$ — норма вектора. Рассмотрим модель анализа данных в форме следующей задачи среднеквадратического приближения.

Дано: последовательность $\boldsymbol{y}_n \in \mathbb{R}^q$, $n \in \mathcal{N}$, совокупность $\mathcal{W}$ наборов векторов из $\mathbb{R}^q$ и натуральные числа $T_{\min}$ и $T_{\max}$.

Найти: последовательность $\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_J$ векторных наборов из совокупности $\mathcal{W}$, а так же подмножество $\{n_1, \ldots, n_M\} \subseteq \mathcal{N}$ номеров такие, что целевая функция (5) минимальна, при ограничениях (2) на элементы набора $\{n_1, \ldots, n_M\}$ и при условии, что структура аппроксимирующей последовательности описывается формулой (1).

В этой задаче совокупность $\mathcal{W}$ наборов векторов соответствует семейству возможных поведений объекта. Элементы набора $\boldsymbol{w} \in \mathcal{W}$ соответствуют элементарным активным состояниям объекта.

Из (1) видно, что последовательность $\boldsymbol{x}_n$, $n \in \mathcal{N}$, содержит J участков, каждый из которых можно трактовать как участок, соответствующий некоторому типовому поведению объекта. Элементы набора $(n_1, \ldots, n_M)$ — номера ненулевых векторов в последовательности (1) — трактуются как моменты времени, в которые объект находится в активном состоянии. Переменная s_j, $j = 1, \ldots, J$, обозначает порядковый номер вектора в последовательности (1), завершающего j-й векторный набор (последний J-й набор может лишь частично входить в состав последовательности (1)). Эта переменная соответствует порядковому номеру момента времени, после которого объект изменяет типовое поведение. Неравенства (2) устанавливают допустимый интервал между двумя ближайшими номерами ненулевых векторов в последовательности (1) и интерпретируются как ограничения на время нахождения объекта в пассивном состоянии.

Легко установить, что если $\boldsymbol{e}_n$ в формуле (4) есть выборка единичного объема из q-мерного нормального распределения с параметрами $(0, \sigma^2 I)$, где I единичная матрица, а в качестве критерия решения задачи использовать максимум функционала правдоподобия, то статистический подход к рассматриваемой проблеме обнаружения и идентификации приводит к такой же сформулированной выше задаче среднеквадратического приближения.

Редуцированная задача

Раскрывая квадрат нормы в формуле (5) с учетом (1), получим

$$S = \sum_{n \in \mathcal{N}} \|\boldsymbol{y}_n\|^2 - \Bigg\{ \sum_{j=1}^{J-1} \sum_{m=s_{j-1}+1}^{s_j} \big(2\langle \boldsymbol{y}_{n_m}, \boldsymbol{u}_{m-s_{j-1}}^j \rangle - \|\boldsymbol{u}_{m-s_{j-1}}^j\|^2\big) + \sum_{m=s_{J-1}+1}^{M} \big(2\langle \boldsymbol{y}_{n_m}, \boldsymbol{u}_{m-s_{J-1}}^J \rangle - \|\boldsymbol{u}_{m-s_{J-1}}^J\|^2\big) \Bigg\},$$

где $\langle\cdot,\cdot\rangle$ — скалярное произведение векторов.

Первое слагаемое в правой части полученного выражения — константа. Поэтому минимизация функционала $S(\cdot)$ сводится к максимизации выражения в фигурных скобках в правой части этого выражения.

Обозначим через $L(\boldsymbol{w})$ размерность набора $\boldsymbol{w}\in\mathcal{W}$. Положим $\boldsymbol{w}=(\boldsymbol{u}_1,\ldots,\boldsymbol{u}_{L(\boldsymbol{w})})$. Определим функцию

$$g(\boldsymbol{w},i,n)=2\langle\boldsymbol{y}_n,\boldsymbol{u}_i\rangle-\|\boldsymbol{u}_i\|^2,$$

где $i\in\{1,\ldots,L(\boldsymbol{w})\}$, $n\in\mathcal{N}$. В соответствии с введенными обозначениями имеем следующую редуцированную оптимизационную задачу, к которой сводится сформулированная задача анализа данных.

Задача DIVTS (Detection and Identification of Vector Tuples in a Sequence).

Дано: последовательность $\boldsymbol{y}_n\in\mathbb{R}^q$, $n\in\mathcal{N}$, совокупность $\mathcal{W}$ наборов векторов из $\mathbb{R}^q$ и натуральные числа $T_{\min}$ и $T_{\max}$.

Найти: подмножество $\{n_1,\ldots,n_M\}\subseteq\mathcal{N}$ номеров и последовательность $\boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_J$ векторных наборов из совокупности $\mathcal{W}$ такие, что целевая функция

$$G=\sum_{j=1}^{J-1}\sum_{m=s_{j-1}+1}^{s_j}g(\boldsymbol{w}_j,m-s_{j-1},n_m)+\\+\sum_{m=s_{J-1}+1}^{M}g(\boldsymbol{w}_J,m-s_{J-1},n_m),$$

где $s_0=0$, максимальна, при ограничениях (2) на элементы набора $\{n_1,\ldots,n_M\}$.

Алгоритм решения задачи

Из (2) следует, что $M^-\leqslant M\leqslant M^+$, где $M^-=1$, $M^+=\lfloor(N-1)/T_{\min}+1\rfloor$. Справедлива следующая

Теорема 1. *При каждом $M\in\{1,\ldots,M^+\}$ максимум целевой функции G в задаче DIVTS определяется по формуле*

$$G_{\max}(M)=\max_{\boldsymbol{w}\in\mathcal{W}}\max_{i\in\{1,\ldots,L(\boldsymbol{w})\}}\max_{n\in\omega_M(M)}G_M(\boldsymbol{w},i,n),$$

а значения функции $G_M(\boldsymbol{w},i,n)$, $\boldsymbol{w}\in\mathcal{W}$, $i\in\{1,\ldots,L(\boldsymbol{w})\}$, $n\in\omega_M(M)$, находятся по рекуррентным формулам:

$$G_m(\boldsymbol{w},i,n)=-\infty,\ m=1,\ldots,M,$$

для всех $\boldsymbol{w}\in\mathcal{W}$, $i\in\{1,\ldots,L(\boldsymbol{w})\}$, если $n\notin\omega_m(M)$;

$$G_m(\boldsymbol{w},i,n)=\\=\begin{cases}g(\boldsymbol{w},1,n),\ \text{если } m=1,\ i=1;\\ -\infty,\qquad \text{если } m=1,\ i=2,\ldots,L(\boldsymbol{w});\\ g(\boldsymbol{w},1,n)+\max\limits_{\boldsymbol{v}\in\mathcal{W}}\max\limits_{j\in\gamma^-_{m-1}(n)}G_{m-1}\big(\boldsymbol{v},L(\boldsymbol{v}),j\big),\\ \qquad\qquad\text{если } m=2,\ldots,M,\ i=1;\\ g(\boldsymbol{w},i,n)+\max\limits_{j\in\gamma^-_{m-1}(n)}G_{m-1}(\boldsymbol{w},i-1,j),\\ \qquad\qquad\text{если } m=2,\ldots,M,\ i=2,\ldots,L(\boldsymbol{w}),\end{cases}$$

где $\boldsymbol{w}\in\mathcal{W}$, а $n\in\omega_m(M)$, причем

$$\omega_m(M)=\big\{n\,\big|\,(m-1)T_{\min}+1\leqslant n\leqslant N-(M-m)T_{\min}\big\},$$

при каждом $m=1,\ldots,M$, и

$$\gamma^-_{m-1}(n)=\big\{j\;\big|\;\max\{(m-2)T_{\min}+1,n-T_{\max}\}\leqslant\\\leqslant j\leqslant n-T_{\min}\big\},\quad n\in\omega_m(M),$$

при каждом $m=2,\ldots,M$.

Для вычисления значений компонент оптимальных наборов $(\hat{n}_1,\ldots,\hat{n}_M)$ и $(\hat{\boldsymbol{w}}_1,\ldots,\hat{\boldsymbol{w}}_{\hat{J}})$ для каждого $m=2,\ldots,M$ определим пару вспомогательных функций:

$$\boldsymbol{t}_m(n)\;=\;\arg\max_{\boldsymbol{w}\in\mathcal{W}}\Big\{\max_{j\in\gamma^-_{m-1}(n)}G_{m-1}\big(\boldsymbol{w},L(\boldsymbol{w}),j\big)\Big\},$$

где $n\in\omega_m(M)$, и

$$I_m(\boldsymbol{w},i,n)=\\=\begin{cases}\arg\max\limits_{j\in\gamma^-_{m-1}(n)}G_{m-1}\big(\boldsymbol{t}_m(n),L\big(\boldsymbol{t}_m(n)\big),j\big),\\ \qquad\qquad\text{если } i=1;\\ \arg\max\limits_{j\in\gamma^-_{m-1}(n)}G_{m-1}(\boldsymbol{w},i-1,j),\\ \qquad\qquad\text{если } i=2,\ldots,L(\boldsymbol{w}),\end{cases}$$

где $\boldsymbol{w}\in\mathcal{W}$, $n\in\omega_m(M)$.

В соответствии с (1) и (3) имеем равенство

$$(\boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_J)=\\=\big((\boldsymbol{u}^1_1,\ldots,\boldsymbol{u}^1_{L_1}),\ldots,(\boldsymbol{u}^J_1\ldots,\boldsymbol{u}^J_{M-s_{J-1}})\big).$$

Перенумеруем элементы этого набора так, что

$$(\boldsymbol{u}^1_1,\ldots,\boldsymbol{u}^1_{L_1},\ldots,\boldsymbol{u}^J_1,\ldots,\boldsymbol{u}^J_{M-s_{J-1}})=\\=(\boldsymbol{u}_{k_1}(\boldsymbol{v}_1),\ldots,\boldsymbol{u}_{k_M}(\boldsymbol{v}_M)),$$

где

$$k_m=m-s_{j-1},\quad\text{если } s_{j-1}<m\leqslant s_j;\\ \boldsymbol{v}_m=\boldsymbol{w}_j,\quad\text{если } s_{j-1}<m\leqslant s_j,$$

при $j=1,\ldots,J$ для каждого $m=1,\ldots,M$. Тогда между элементами этого векторного набора и элементами набора $(\boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_J)$ имеем очевидное соответствие:

$$\boldsymbol{w}_1=\boldsymbol{v}_1,\ \boldsymbol{w}_j=\boldsymbol{v}_{L(\boldsymbol{v}_1)+\ldots+L(\boldsymbol{v}_{j-1})+1},\ j=2,\ldots,J,$$

причем

$$\big|\{m \,|\, m \in \{1,\dots,M\},\ k_m = 1\}\big| = J.$$

Следствие 1. *При каждом фиксированном* $M \in \{1,\dots,M^+\}$ *имеем:*

1) последняя компонента оптимального набора $(\hat n_1,\dots,\hat n_M)$ *определяется по правилу*

$$\hat n_M = \arg\max_{n\in\omega_M} G_M(\hat{\boldsymbol v}_M, \hat k_M, n),$$

где

$$\hat{\boldsymbol v}_M = \arg\max_{\boldsymbol w\in\mathcal W}\Big\{\max_{i\in\{1,\dots,L(\boldsymbol w)\}}\ \max_{n\in\omega_M(M)} G_M(\boldsymbol w, i, n)\Big\},$$

$$\hat k_M = \arg\max_{i\in\{1,\dots,L(\hat{\boldsymbol v}_M)\}}\Big\{\max_{n\in\omega_M(M)} G_M(\hat{\boldsymbol v}_M, i, n)\Big\},$$

а оставшиеся компоненты этого набора вычисляются по рекуррентной формуле

$$\hat n_{m-1} = I_m(\hat{\boldsymbol v}_m, \hat k_m, \hat n_m),\ \ m = M, M-1,\dots,2,$$

где

$$\hat{\boldsymbol v}_{m-1} = \begin{cases} \hat{\boldsymbol v}_m, & \text{если } \hat k_m > 1;\\ \boldsymbol t_m(\hat n_m), & \text{если } \hat k_m = 1;\end{cases}$$

$$\hat k_{m-1} = \begin{cases} \hat k_m - 1, & \text{если } \hat k_m > 1;\\ L(\hat{\boldsymbol v}_{m-1}), & \text{если } i = 1;\end{cases}$$

2) размерность $\hat J$ *оптимального набора* $(\hat{\boldsymbol w}_1,\dots,\hat{\boldsymbol w}_{\hat J})$ *и его компоненты определяются по правилу:*

$$\hat J = \big|\{m \,|\, m \in \{1,\dots,M\}, \hat k_m = 1\}\big|;$$

$$\hat{\boldsymbol w}_1 = \hat{\boldsymbol v}_1,\ \hat{\boldsymbol w}_j = \hat{\boldsymbol v}_{L(\hat{\boldsymbol v}_1)+\dots+L(\hat{\boldsymbol v}_{j-1})} + 1,\ j = 2,\dots,\hat J.$$

Алгоритм $\mathcal A_1$ решения задачи DIVTS при фиксированном $M \in \{1,\dots,M^+\}$ заключается в вычислениях по формулам теоремы 1 (прямой ход) и следствия 1 (обратный ход).

Алгоритм $\mathcal A_2$ ориентирован на случай, когда M неизвестно. Этот алгоритм состоит в вычислении $G_{\max}(M)$ для каждого допустимого $M \in \{1,\dots,M^+\}$ с помощью алгоритма $\mathcal A_1$ и последующим выбором наибольшего среди найденных значений.

Замечание 1. В случае возникновения неоднозначности при обработке последнего неполного набора в качестве решения выбирается любой такой набор из совокупности $\mathcal W$, что поднабор из его первых элементов совпадает с неполным набором.

Следствие 2. *При каждом фиксированном* $M \in \{1,\dots,M^+\}$ *временная сложность алгоритма* $\mathcal A_1$ *есть величина* $O\big(KMN(T_{\max}-T_{\min}+1)(L_{\max}+K)\big)$. *Временная сложность алгоритма* $\mathcal A_2$ *есть величина* $O\big(K(M^+)^2N(T_{\max}-T_{\min}+1)(L_{\max}+K)\big)$.

Замечание 2. Если числа $T_{\min}$ и $T_{\max}$ неизвестны, то в соответствии с (2) достаточно положить $T_{\min} = 1$ и $T_{\max} = N-1$. В этом случае временные сложности алгоритмов $\mathcal A_1$ и $\mathcal A_2$ есть величины $O\big(KMN^2(L_{\max}+K)\big)$ и $O\big(K(M^+)^2N^2(L_{\max}+K)\big)$ соответственно.

Заключение

Задача DIVTS входит в большое семейство актуальных задач, к которым сводятся типовые проблемы [6] помехоустойчивого off-line анализа и распознавания структурированных данных в виде числовых и векторных последовательностей, включающих повторяющиеся, чередующиеся и перемежающиеся информационно значимые фрагменты или векторы. В данной работе обоснован точный эффективный алгоритм для решения этой задачи. Этот алгоритм является ядром помехоустойчивой процедуры обработки реальных данных.

Литература

[1] *Кельманов А. В., Хамидуллин С. А.* Апостериорное совместное обнаружение и различение заданного числа подпоследовательностей в квазипериодической последовательности // Сиб. журн. индустриальной математики. — 1999. — Т. 2, № 4. — С. 106–119.

[2] *Кельманов А. В., Окольнишникова Л. В.* Апостериорное совместное обнаружение и различение подпоследовательностей в квазипериодической последовательности // Сиб. журн. индустриальной математики. — 2000. — Т. 3, № 2(6). — С. 115–139.

[3] *Кельманов А. В., Михайлова Л. В., Хамидуллин С. А.* Апостериорное обнаружение в квазипериодической последовательности повторяющегося набора эталонных фрагментов // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 2008. — Т. 48, № 12. — С. 2247–2260.

[4] *Кельманов А. В., Михайлова Л. В., Хамидуллин С. А.* Оптимальное обнаружение в квазипериодической последовательности повторяющегося набора эталонных фрагментов // Сиб. журн. вычисл. математики. — 2008. — Т. 11, № 3. — С. 311–327.

[5] *Кельманов А. В., Михайлова Л. В., Хамидуллин С. А.* Об одной задаче поиска упорядоченных наборов фрагментов в числовой последовательности // Дискретный анализ и исследование операций. — 2009. — Т. 16, № 4. — С. 31–46.

[6] `http://math.nsc.ru/~serge/qpsl/` — Система QPSLab для решения задач компьютерного анализа и распознавания числовых последовательностей с квазипериодической структурой — 2008.

Исследование математических моделей и декомпозиционных алгоритмов для решения двухстадийной задачи размещения*

Колоколов А. А., Леванова Т. В., Федоренко А. С.
kolo@ofim.oscsbras.ru, levanova@ofim.oscsbras.ru
Омск, Омский филиал Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН

Исследуется двухстадийная задача размещения предприятий и возможности применения к ней метода декомпозиции Бендерса. Предлагаются декомпозиционные алгоритмы решения рассматриваемой задачи и обсуждаются результаты вычислительного эксперимента.

Analysis of mathematical models and decomposition algorithms for solving two-stage facility location problem*

Kolokolov A. A., Levanova T. V., Fedorenko A. S.
Omsk Branch of Sobolev Institute of Mathematics, Omsk, Russia

Two-stage facility location problem is studied using Benders decomposition approach. The decomposition algorithms for solving this problem and experimental results are presented.

Задачи оптимального размещения предприятий имеют многочисленные приложения, возникающие при планировании развития производства, проектировании, в стандартизации и других областях [2, 4, 6]. В моделях целочисленного линейного программирования для таких задач содержатся переменные открытия предприятий и переменные прикрепления клиентов. Ввиду этого для их решения широко применяются декомпозиционные алгоритмы, в том числе метод декомпозиции Бендерса [1]. В ряде работ указанный метод используется в сочетании с другими подходами (например, со схемой Балаша, перебором L-классов [8]). Интересные результаты получены при реализации метода для простейшей задачи размещения и задачи о p-медиане [3, 4, 7].

Данная работа представляет собой продолжение исследований [9] в направлении анализа математических моделей и декомпозиционных алгоритмов для двухстадийной задачи размещения предприятий.

Постановка задачи

Рассматривается двухстадийная задача размещения в следующей постановке [5]. Известны предприятия, выпускающие некоторую продукцию, и ее потребители. Предприятия делятся на два множества, отражающие стадии производства продукции (нижний уровень) и ее реализации (верхний уровень), причем каждое предприятие верхнего уровня связано с несколькими предприятиями нижнего уровня. В удовлетворении спроса потребителей участвуют лишь предприятия верхнего уровня. Предполагается, что они могут обслуживать любое количество потребителей. Потребитель же должен обслуживаться лишь одним предприятием. Предприятие верхнего уровня считается открытым, если таковыми являются все связанные с ним предприятия нижнего уровня. Заданы стоимости открытия предприятий, известны затраты на удовлетворение спроса каждого потребителя предприятиями верхнего уровня. Требуется найти набор предприятий верхнего и нижнего уровня, суммарные затраты на открытие которых и удовлетворение спроса всех потребителей минимальны.

Введем следующие обозначения:

$I = \{1, \ldots, m\}$ — множество номеров предприятий верхнего уровня;

$L = \{1, \ldots, r\}$ — множество номеров предприятий нижнего уровня;

$J = \{1, \ldots, n\}$ — множество номеров потребителей;

$d_i \geqslant 0$ — стоимость открытия предприятия i верхнего уровня, $i \in I$;

$c_l \geqslant 0$ — стоимость открытия предприятия l нижнего уровня, $l \in L$;

G — матрица производственных связей; величина $g_{il} = 1$, если предприятия i и l связаны, в противном случае $g_{il} = 0,\ i \in I,\ l \in L$;

t_{ij} — стоимость обслуживания потребителя j предприятием i, $i \in I,\ j \in J$.

Введем булевы переменные z: $z_i = 1$, если предприятие i верхнего уровня открыто, иначе $z_i = 0$, $i \in I$. Аналогично определяются булевы переменные y_l для предприятий нижнего уровня, $l \in L$. Кроме того, $x_{ij} = 1$, если предприятие i удовлетворяет спрос потребителя j, $x_{ij} = 0$ — в противном случае, $i \in I,\ j \in J$.

С использованием введенных обозначений модель целочисленного линейного программирования (ЦЛП) для двухстадийной задачи размещения (обозначим ее M_1) может быть записана следую-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-01-00598.

щим образом:

$$F(z,y,X)=\sum_{l\in L}c_l y_l+\sum_{i\in I}d_i z_i+ \\ +\sum_{i\in I}\sum_{j\in J}t_{ij}x_{ij}\to\min \quad (1)$$

при условиях

$$\sum_{i\in I}x_{ij}=1,\quad j\in J; \quad (2)$$

$$z_i\geqslant x_{ij},\quad i\in I,\ j\in J; \quad (3)$$

$$y_l\geqslant g_{il}z_i,\quad i\in I,\ l\in L; \quad (4)$$

$$x_{ij},y_l,z_i\in\{0,1\},\quad i\in I,\ j\in J,\ l\in L. \quad (5)$$

Целевая функция (1) отражает суммарные затраты на открытие предприятий верхнего и нижнего уровней и удовлетворение спроса потребителей. Равенства (2) гарантируют удовлетворение спроса каждого потребителя, а условия (3) отвечают за то, чтобы потребителей обслуживали только открытые предприятия верхнего уровня. Неравенства (4) показывают, что если предприятия верхнего уровня открыты, то также должны быть открыты и связанные с ними предприятия нижнего уровня.

В [5] отмечено, что в сформулированной задаче условия (3) могут быть заменены на неравенства

$$y_l\geqslant\sum_{i\in I}g_{il}x_{ij},\ j\in J,\ l\in L \quad (6)$$

без изменения множества оптимальных решений. Таким образом, мы получаем другую модель целочисленного линейного программирования (1)–(3), (5), (6), обозначим её M_2.

При определённых условиях двухстадийная задача преобразуется в простейшую задачу размещения (ПЗР). Таким образом, некоторые результаты, полученные для ПЗР, справедливы и для двухстадийной задачи размещения.

В дальнейшем для исследования моделей нам потребуются следующие неравенства:

$$x_{ij}\geqslant 0,\ 1\geqslant y_l\geqslant 0,\ z_i\geqslant 0,\ i\in I,\ j\in J,\ l\in L. \quad (7)$$

Под многогранником задачи (1)–(5) будем понимать множество, определяемое системой ограничений (2)–(4) и условиями (7).

Введём обозначения: $P\mathrm{M}_1$ — многогранник задачи (1)–(5), $P\mathrm{M}_2$ — многогранник, соответствующий M_2; $D\mathrm{M}_1$, $D\mathrm{M}_2$ — множества допустимых решений для этих задач.

Нами исследовалось соотношение между многогранниками описанных моделей ЦЛП. Было установлено, что для допустимых решений моделей ЦЛП двухстадийной задачи размещения предприятий имеет место включение: $D\mathrm{M}_1\subseteq D\mathrm{M}_2$.

Кроме того, нетрудно привести пример двухстадийной задачи размещения, показывающий, что многогранники $P\mathrm{M}_1$ и $P\mathrm{M}_2$ не содержатся один в другом.

Метод декомпозиции Бендерса

В основе рассматриваемого метода решения задач частично целочисленного линейного программирования лежит декомпозиция исходной задачи на две подзадачи меньшей размерности [1]. В одной из них представлены только целочисленные переменные (задача ЦП), а в другой — непрерывные (задача ЛП). Допустимая область целочисленной задачи постепенно сужается путем добавления новых ограничений (отсечений). Задача ЛП служит для порождения новых ограничений и проверки оптимальности решения задачи ЦП.

В данном разделе предлагается одна из возможных модификаций декомпозиционного подхода применительно к двухстадийной задаче размещения. Ее особенностью является наличие производственных планов двух видов: векторы z и y открытия предприятий верхнего и нижнего уровней. В связи с этим возможно проведение декомпозиции несколькими способами, фиксируя, например, переменные z и y или только z. При этом формируются различные производственные задачи, задачи ЛП и, как следствие, различные отсечения Бендерса. В силу специфики рассматриваемой задачи в алгоритме используются только линейные неравенства, предназначенные для улучшения рекорда целевой функции, аналогичные отсечениям Бендерса первого типа [10].

Опишем один из вариантов декомпозиции на примере модели M_1. В этом варианте задача целочисленного линейного программирования состоит в отыскании вектора z, удовлетворяющего условиям

$$\sum_{i\in I}\gamma_{ir}z_i\geqslant\gamma_{0r},\ r\in\{1,\dots,\tau\},\ z_i\in\{0,1\},\ i\in I, \quad (8)$$

где (8) — некоторые отсечения, построенные ранее, τ — их число.

Фиксируя значения переменных z, являющихся решением задачи ЦП, получим соответствующую задачу линейного программирования $\mathrm{LP}(z)$:

$$\sum_{l\in L}c_l y_l+\sum_{i\in I}\sum_{j\in J}t_{ij}x_{ij}\to\min \quad (9)$$

при условиях

$$\sum_{i\in I}x_{ij}=1,\quad j\in J; \quad (10)$$

$$x_{ij}\leqslant z_i,\quad i\in I,\ j\in J; \quad (11)$$

$$y_l\geqslant g_{il}z_i,\quad i\in I,\ l\in L; \quad (12)$$

$$y_l\leqslant 1,\quad l\in L; \quad (13)$$

$$x_{ij}\geqslant 0,\quad i\in I,\ j\in J. \quad (14)$$

Для $\mathrm{LP}(z)$ строим двойственную задачу $\mathrm{D}(z)$:

$$\sum_{j\in J} u_j - \sum_{i\in I}\sum_{j\in J} z_i v_{ij} + \\ + \sum_{i\in I}\sum_{l\in L} g_{il} z_i w_{il} - \sum_{l\in L} s_l \to \max$$

при условиях

$$u_j - v_{ij} \leqslant t_{ij}, \quad i\in I,\ j\in J;$$
$$\sum_{i\in I} w_{il} - s_l \leqslant c_l, \quad l\in L;$$
$$v_{ij}, w_{il}, s_l \geqslant 0, \quad i\in I,\ j\in J,\ l\in L.$$

Заметим, что задача (9)–(14) распадается на две непересекающиеся по переменным подзадачи. Первая задача LP_1 с переменными x:

$$\sum_{i\in I}\sum_{j\in J} t_{ij} x_{ij} \to \min$$

при условиях

$$\sum_{i\in I} x_{ij} = 1, \quad j\in J;$$
$$x_{ij} \leqslant z_i, \quad i\in I,\ j\in J;$$
$$x_{ij} \geqslant 0, \quad i\in I,\ \ j\in J.$$

Вторая задача LP_2 с переменными y:

$$\sum_{l\in L} c_l y_l \to \min$$

при условиях

$$y_l \geqslant g_{il} z_i, \quad i\in I,\ l\in L;$$
$$y_l \leqslant 1, \quad l\in L;$$
$$y_l \geqslant 0, \quad l\in L.$$

Задачу $\mathrm{D}(z)$, двойственную к (9)–(12), также можно разбить на две непересекающиеся подзадачи. Первая задача D_1 с переменными u и v имеет вид:

$$\sum_{j\in J} u_j - \sum_{i\in I}\sum_{j\in J} z_i v_{ij} \to \max$$

при условиях

$$u_j - v_{ij} \leqslant t_{ij}, \quad i\in I,\ j\in J;$$
$$v_{ij} \geqslant 0, \quad i\in I,\ j\in J.$$

Вторая задача D_2 с переменными w:

$$\sum_{i\in I}\sum_{l\in L} g_{il} z_i w_{il} - \sum_{l\in L} s_l \to \max$$

при условиях

$$\sum_{i\in I} w_{il} - s_l \leqslant c_l, \quad l\in L;$$
$$w_{il}, s_l \geqslant 0, \quad i\in I,\ l\in L.$$

Нетрудно проверить, что приведённые выше подзадачи D_1, D_2 будут двойственными к LP_1 и LP_2.

Ввиду относительной простоты двойственной задачи её оптимальные решения могут быть найдены аналитически.

Опишем более подробно декомпозиционный алгоритм для модели M_1. Обозначим:

$\mathrm{P}^{(k)}$ — производственная задача на k-й итерации, $\Omega^{(k)}$ — множество её допустимых решений, $z^{(k)}$ — оптимальное решение;

$\mathrm{LP}(z^{(k)})$ — соответствующая задача линейного программирования, $(y^{(k)}, x^{(k)})$ — её оптимальное решение;

$\mathrm{D}(z^{(k)})$ — двойственная к $\mathrm{LP}(z^{(k)})$ задача;

$F^{(0)}$ — начальное значение рекорда целевой функции, $F^{(k)}$ — его значение на k-й итерации.

Декомпозиционный алгоритм.

Шаг 0 (предварительный). Полагаем начальное значение рекорда $F^0 = +\infty$. Формулируем исходную задачу целочисленного программирования $\mathrm{P}^{(1)}$: найти лексикографически максимальную точку множества $\Omega^{(1)}$, которое определяется системой:

$$\sum_{i\in I} \gamma_{ri} z_i \geqslant 1, \quad r = 1,\ldots,\tau; \qquad (15)$$
$$z_i \in \{0,1\}, \quad i\in I.$$

Неравенства (15) могут быть получены на основе некоторых эвристик на более раннем этапе, τ — число таких неравенств.

Итерация $k, k \geqslant 1$.

Шаг 1. Решаем задачу $\mathrm{P}^{(1)}$ с помощью алгоритма перебора L-классов. Если она неразрешима, то производственно-транспортный план, на котором достигается рекорд $F^{(k-1)}$, является оптимальным решением исходной задачи. Процесс решения завершается.

Шаг 2. Формулируем и решаем задачу линейного программирования $\mathrm{LP}(z^{(k)})$:

$$\sum_{l\in L} c_l y_l + \sum_{i\in I}\sum_{j\in J} t_{ij} x_{ij} \to \min$$

при условиях

$$\sum_{i\in I} x_{ij} = 1, \quad j\in J;$$
$$z_i^{(k)} \geqslant x_{ij}, \quad i\in I,\ j\in J;$$
$$y_l \geqslant g_{il} z_i^{(k)}, \quad i\in I,\ l\in L;$$
$$y_l \leqslant 1, \quad l\in L;$$
$$x_{ij} \geqslant 0, \quad i\in I,\ j\in J.$$

Вычисляем

$$F^{(k)} = \min\bigl\{F^{(k-1)}, F(z^{(k)}, y^{(k)}, x^{(k)})\bigr\}.$$

Если $F^{(k)} < F^{(k-1)}$, то $F^{(k-1)}$ заменяем на $F^{(k)}$ в системе отсечений задачи $\mathrm{P}^{(k)}$. Для задачи

$\mathrm{LP}(z^{(k)})$ строим двойственную $D(z^{(k)})$:

$$\sum_{j\in J} u_j - \sum_{i\in I}\sum_{j\in J} z_i^{(k)} v_{ij} + \\ + \sum_{i\in I}\sum_{l\in L} g_{il} z_i^{(k)} w_{il} - \sum_{l\in L} s_l \to \max$$

при условиях

$$u_j - v_{ij} \leqslant t_{ij}, \quad i \in I,\ j \in J;$$
$$\sum_{i\in I} w_{il} - s_l \leqslant c_l, \quad l \in L;$$
$$v_{ij}, w_{il}, s_l \geqslant 0, \quad i \in I,\ j \in J,\ l \in L.$$

Решая её, находим оптимальные значения двойственных переменных $u^{(k)}, v^{(k)}, w^{(k)}, s^{(k)}$.

Шаг 3. Строим следующее неравенство (отсечение Бендерса):

$$\sum_{i\in I}(d_i - \sum_{j\in J} v_{ij}^{(k)} + \sum_{l\in L} g_{il} w_{il}^{(k)}) z_i < \\ < F^{(k)} - \sum_{j\in J} u_j^{(k)} + \sum_{l\in L} s_l^{(k)}. \quad (16)$$

Шаг 4. Формулируем задачу $\mathrm{P}^{(k+1)}$: найти z, который является лексикографически максимальной точкой множества $\Omega^{(k+1)}$, где $\Omega^{(k+1)}$ — множество точек из $\Omega^{(k)}$, удовлетворяющих условию (16).

Переходим к следующей итерации (на шаг 1).

Так как $\Omega^{(0)}$ ограничено, то алгоритм за конечное число шагов найдёт оптимальное решение задачи.

С увеличением числа итераций количество ограничений производственной задачи монотонно растет, скорость алгоритма снижается, накапливаются ошибки округления. Чтобы избежать этого, можно зафиксировать верхнюю ганицу числа неравенств системы (15).

Для анализа работы алгоритма важными являются оценки числа его итераций. Одним из полезных понятий при исследовании числа итераций является глубина отсечений [7], так как исключение бóльшего числа точек может привести к ускорению поиска оптимального решения. Для двухстадийной задачи размещения предприятий нами было построено семейство примеров с глубиной отсечений, равной единице, т. е. сложных для алгоритма декомпозиции Бендерса.

Выводы

Предложенный алгоритм и его модификации были реализованы в виде комплекса программ. Проведён вычислительный эксперимент на различных сериях тестовых примеров, в том числе из известной библиотеки «Дискретные задачи размещения» (`http://math.nsc.ru/AP/benchmarks/`). Для ряда тестовых задач алгоритм показал преимущество перед схемами, построенными на основе метода ветвей и границ. В настоящее время выполняется анализ экспериментальных данных с точки зрения глубины отсечений, мощности используемой системы ограничений, времени нахождения оптимума и др. Представляется перспективным сочетание приближённых методов с декомпозиционной схемой. Большого внимания заслуживает дальнейшее развитие исследуемого подхода для решения многостадийной задачи размещения в направлении применения различных вариантов декомпозиции к другим моделям рассматриваемой задачи.

Литература

[1] *Benders J. F.* Partitioning Procedures for Solving Mixed-variables Programming Problems // Numer. Math. — 1962. — Vol. 4, No. 3. — Pp. 238–252.

[2] *Ed. by Pitu B. Mirchandani and Richard L. Franscis* Discrete Location Theory. — John Wiley and Sons, Inc., 1990. — 576 p.

[3] *Kolokolov A. A.* Decomposition Algorithms for Solving of some Production-Transportation Problems // Triennal Symposium on Transportation Analysis II. Preprints. — 1994. — Vol. 1. — Pp. 179–183.

[4] *Бахтин А. Е., Колоколов А. А., Коробкова З. В.* Дискретные задачи производственно-транспортного типа. — Новосибирск: Наука, 1978. — 160 с.

[5] *Береснев В. Л.* Дискретные задачи размещения и полиномы от булевых переменных. — Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2005. — 450 с.

[6] *Береснев В. Л., Гимади Э. Х., Дементьев В. Т.* Экстремальные задачи стандартизации. — Новосибирск: Наука, 1978. — 335 с.

[7] *Колоколов А. А., Косарев Н. А., Рубанова Н. А* Исследование отсечений Бендерса в декомпозиционных алгоритмах решения некоторых задач размещения // Омский научный вестник. — 2005. — № 2 (31). — С. 76–80.

[8] *Колоколов А. А., Леванова Т. В.* Алгоритмы декомпозиции и перебора L-классов для решения некоторых задач размещения // Вестник Омского университета. — 1996. — № 1. — С. 21–23.

[9] *Колоколов А. А., Леванова Т. В., Федоренко А. С.* Декомпозиция Бендерса для двухстадийной задачи размещения // Труды XIV Байкальской международной школы-семинара «Методы оптимизации и их приложения», Иркутск: ИСЭМ СО РАН, 2008. — Т. 1. — С. 435–443.

[10] *Сергиенко И. В.* Математические модели и методы решения задач дискретной оптимизации. — Киев: Наукова думка, 1988. — 472 с.

Метаэвристики для одной задачи сжатия информации*

Кочетов Ю. А.
jkochet@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский госуниверситет

Разработаны и исследованы итерационные методы локального поиска для одной задачи сжатия информации. Проведённые численные исследования подтверждают высокую эффективность методов на тестовых примерах, порождаемых с помощью датчика псевдослучайных чисел.

Metaheuristics for a data compression problem *

Kochetov Y. A.
Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

Iterative local search methods are developed and studied for a data compression problem. Computational experiments for the random generated benchmarks confirm the hight efficiency of the approach.

Введение

При сжатии и хранении информации возникает следующая комбинаторная задача [1]. Задана матрица из нулей и единиц. Требуется так переставить ее столбцы, чтобы число нулей, «зажатых» между единицами, было минимальным. Если существует перестановка столбцов, при которой все единицы в каждой строке идут подряд, то задача решается с полиномиальной трудоемкостью [2]. Если же такой перестановки нет, то задача минимизации числа зажатых нулей является NP-трудной [3]. В настоящей работе для решения этой задачи разработаны три итерационных алгоритма локального поиска: алгоритм имитации отжига, вероятностный алгоритм поиска с запретами и генетический алгоритм, позволяющие в асимптотике находить точное решение задачи. Приводятся результаты численных экспериментов, свидетельствующие о высокой частоте получения оптимума за несколько минут расчетов на персональном компьютере при размерности матриц 100×100.

Постановка задачи

Введем следующие обозначения:
$I = \{1, \ldots, n\}$ — множество строк матрицы;
$J = \{1, \ldots, m\}$ — множество столбцов матрицы;
$T = \{1, \ldots, m\}$ — множество позиций для столбцов матрицы;
(a_{ij}) — $(0,1)$-матрица размерности $n \times m$;
$w_i > 0$ — вес i-й строки.

Переменные задачи:
$s_i \geqslant 1$ — номер первой единицы в i-строке;
$f_i \geqslant 1$ — номер последней единицы в i-строке;
$x_{jt} = 1$, если столбец j стоит на позиции t и $x_{jt} = 0$ в противном случае.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (проекты № 09-01-00059, № 08-07-00037), целевой программы АВЦП Рособразования (проект № 2.1.1/3235).

Математическая постановка задачи в терминах целочисленного линейного программирования может быть представлена следующим образом [4]:

$$\min \sum_{i\in I} w_i\,(f_i - s_i + 1); \tag{1}$$

$$\sum_{t\in T} x_{jt} = 1, \quad j \in J; \tag{2}$$

$$\sum_{j\in J} x_{jt} = 1, \quad t \in T; \tag{3}$$

$$a_{ij}s_i \leqslant \sum_{t\in T} t a_{ij} x_{jt} \leqslant f_i, \quad i \in I,\ j \in J; \tag{4}$$

$$f_i \geqslant 1,\ s_i \geqslant 1,\ \text{целые}, \quad i \in I;$$

$$x_{jt} \in \{0,1\}, \quad j \in J, t \in T.$$

Целевая функция (1) с точностью до константы задает взвешенное число зажатых между единицами нулей. Равенство (2) требует одной позиции для каждого столбца, а равенство (3) выделяет один столбец для каждой позиции. Ограничение (4) определяет первую и последнюю единицу в каждой строке. Заметим, что переменные f_i, s_i однозначно определяются матрицей (x_{jt}). Поэтому далее решением будем называть только матрицу (x_{jt}).

Конструктивная эвристика

Идея алгоритма заключается в получении перестановки столбцов матрицы (a_{ij}), в которой столбцы с наименьшим расстоянием по Хеммингу стояли бы как можно ближе друг к другу. Приведём общую схему алгоритма.

1: выбрать один из столбцов матрицы и поставить его первым;
2: **для** $i = 2, \ldots, m$
3: выбрать из неиспользованных столбцов наиболее близкий к $(i-1)$-му столбцу; поставить его на i-е место.

Таблица 1. Сравнение окрестностей.

	Вставка + 2-Opt			*Отражение*		
№	F	Iter	ε	F	Iter	ε
1	53444	98	100,32	30180	145	13,12
2	52015	95	104,11	28283	138	10,98
3	55116	99	128,11	28769	151	19,07
4	57230	93	108,51	33604	140	22,43
5	53163	99	102,62	32778	146	24,93

Для уменьшения погрешности алгоритма будем использовать все столбцы в качестве первого и выбирать из полученных решений наилучшее.

Результаты тестовых расчётов показывают, что данный алгоритм имеет наибольшую погрешность на сильно разреженных матрицах. Поэтому в дальнейшем в качестве тестовых примеров будем брать разреженные матрицы.

Окрестности

Решение (x_{jt}) определяет перестановку столбцов матрицы (a_{ij}). Рассмотрим следующие окрестности для такой перестановки:

— окрестностью *Вставка* назовем множество решений, получаемых из исходного перемещением одного столбца в новую позицию;
— окрестностью *Отражение* назовем множество решений, получаемых из исходного путем обращения порядка столбцов между двумя произвольно выбранными позициями;
— окрестностью k-*Opt* назовем множество решений, получаемых из исходного путём перехода к перестановке, отличающейся от исходной ровно в k позициях.

Окрестности *Вставка*, *Отражение*, *2-Opt* являются квадратичными по мощности. Окрестности *3-Opt* и *4-Opt* имеют мощность большего порядка, что затрудняет их использование для локального поиска.

В таблице 1 приведены результаты численных экспериментов для пяти примеров. Для каждого из них 100 раз применялась процедура локального спуска со случайно выбранных решений. Среднее значение целевой функции (F), среднее число итераций ($Iter$) и средняя относительная погрешность (ε) показывают превосходство окрестности *Отражение*. Она даёт в 6 раз меньшую погрешность, хотя и тратит в 1,5 раза больше итераций. В дальнейшем переходы по этой окрестности будут преобладать в процедурах локального поиска.

Вероятностный поиск с запретами

Основоположником метода поиска с запретами (Tabu search) является Ф. Гловер, который предложил оригинальную схему локального поиска [5]. Она позволяет алгоритму не останавливаться в точке локального оптимума, как это предписано в стандартном алгоритме локального спуска, а путешествовать от одного оптимума к другому в надежде найти среди них глобальный оптимум. Основным механизмом, позволяющим алгоритму выбираться из локального оптимума, является список запретов. Он строится по предыстории поиска, то есть по нескольким последним пройденным решениям, и запрещает часть окрестности текущего решения. Список запретов учитывает специфику задачи и, как правило, запрещает использование тех «фрагментов» решения (ребер графа, координат вектора, цвета вершин), которые менялись на последних шагах алгоритма. Общая схема вероятностного поиска с запретами может быть представлена следующим образом.

Алгоритм поиска с запретами.

1: построить стартовое решение (x_{jt});
установить текущий рекорд $(x^*_{jt}) := (x_{jt})$;
положить список запретов пустым;
2: **пока** не выполнен критерий остановки
3: сформировать рандомизированную окрестность решения (x_{jt}), исключая решения, попадающие под запреты;
4: выбрать в ней наилучшее решение (x'_{jt}) и положить $(x_{jt}) := (x'_{jt})$;
5: **если** $F(x^*_{jt}) > F(x'_{jt})$ **то**
6: сменить рекорд $(x^*_{jt}) := (x_{jt})$;
7: обновить список запретов.

Если длительное время рекорд не меняется, то используется процедура интенсификации: алгоритм возвращается в наилучшее найденное решение. Далее поиск продолжается по объединению окрестностей *2-Opt* и *Вставка* некоторое число итераций, а затем снова по окрестности *Отражение*.

Если интенсификация не приводит к получению нового рекорда, используется процедура диверсификации. Доля просматриваемой окрестности уменьшается, и алгоритм в течении некоторого числа итераций работает с окрестностью меньшей мощности. Диверсификация позволяет сменить район поиска с целью найти новые перспективные области.

Метод имитации отжига

Экзотическое название данного подхода связано с методами имитационного моделирования в статистической физике, основанными на технике Монте–Карло. Исследование кристаллической решетки и поведения атомов при медленном остывании тела привело к появлению на свет вероятностных алгоритмов, которые оказались чрезвычайно эффективными в комбинаторной опти-

мизации. Впервые это было замечено в 1983 году [6, 7]. Сегодня этот подход является популярным как среди практиков благодаря своей простоте, гибкости и эффективности, так и среди теоретиков, поскольку для него удается аналитически исследовать свойства и доказать асимптотическую сходимость [8].

Алгоритм имитации отжига относится к классу пороговых алгоритмов локального поиска. На каждом шаге в окрестности текущего решения выбирается случайным образом соседнее решение. Если разность по целевой функции между новым и текущим решением неположительна (для задач на максимум — неотрицательна), то новое решение заменяет текущее. В противном случае переход к новому решению происходит с некоторой вероятностью, зависящей от этой разности и управляющего параметра, называемого температурой. Общая схема может быть представлена следующим образом.

Алгоритм имитации отжига.

1: построить стартовое решение (x_{jt});
установить текущий рекорд $(x^*_{jt}) := (x_{jt})$;
определить стартовую температуру $\boldsymbol{c}$
и коэффициент охлаждения $\gamma \in (0, 1)$;
2: **пока** не выполнен критерий остановки
3: **пока** не выполнено ν итераций
4: выбрать произвольного соседа (x'_{jt}) для текущего решения и вычислить величину $\Delta = F(x'_{jt}) - F(x_{jt})$;
5: **если** $\Delta \leqslant 0$ **то**
6: положить $(x_{jt}) := (x'_{jt})$;
7: **иначе**
8: перейти к решению (x'_{jt}) с вероятностью $e^{-\Delta/c}$;
9: **если** $F(x^*_{jt}) > F(x_{jt})$ **то**
10: сменить рекорд $(x^*_{jt}) := (x_{jt})$;
11: Понизить температуру: $c := \gamma c$.

В качестве стартового решения берётся решение, полученное с помощью конструктивной эвристики. Это позволяет начинать поиск с низкой стартовой температуры. Величина ν во внутреннем цикле 3 берётся пропорциональной мощности окрестности *Отражение*.

В алгоритме используется идея чередующихся окрестностей. Она заключается в том, что поочерёдно используются все окрестности, причём окрестность *Отражение* используется чаще других, точнее в 35% случаев.

Если алгоритм долгое время не меняет рекорд, то в качестве диверсификации осуществляется принудительный переход по окрестности *3-Opt* в случайно выбранном направлении. Каждая смена рекорда и смена температуры сопровождается локальным улучшением по объединению окрестностей *2-Opt* и *Вставка*.

Генетический алгоритм

Идея генетических алгоритмов заимствована у живой природы. Она состоит в организации эволюционного процесса на множестве допустимых решений задачи, конечной целью которого является получение оптимального решения. Впервые эти нестандартные идеи были применены к решению оптимизационных задач в середине 70-х годов прошлого столетия [9, 10]. Примерно через десять лет появились первые теоретические обоснования этого подхода [11]. На сегодняшний день генетические алгоритмы доказали свою конкурентоспособность при решении многих NP-трудных задач [12]. Приведем общую схему генетического алгоритма.

Генетический алгоритм.

1: построить начальную популяцию из K решений;
определить рекорд (x^*_{jt}) как лучшее решение в популяции;
2: **пока** не выполнен критерий остановки
3: **пока** не получено L потомков
4: выбрать два родительских решения;
5: применить алгоритм скрещивания;
6: к полученному решению применить алгоритм мутации с вероятностью p_m;
7: добавить новое решение к популяции;
8: убрать из популяции L наихудших решений;
пересчитать рекорд (x^*_{jt}).

В пункте 3 используется следующий алгоритм скрещивания. По двум родительским перестановкам столбцов получим перестановку столбцов потомка. Сначала случайным образом фиксируем $[m/2]$ столбцов первого из родителей, добавляем их на соответствующие места в перестановку потомка, затем на остальные места ставим отсутствующие в текущей перестановке элементы в порядке, в котором они идут в перестановке второго родителя. Мутации потомков происходят путем случайного перехода в соседнее решение по одной из окрестностей. Стартовая популяция генерируется на основе конструктивной эвристики.

Если заданное число итераций не происходит смена рекорда, то применяется процедура интенсификации. Ко всем решениям в популяции применяется алгоритм локального улучшения по рандомизированным окрестностям *Вставка*, *2-Opt*. Каждый элемент этих окрестностей включался в рандомизированную окрестность независимо от других элементов с вероятностью p_o.

Численные эксперименты

Разработанные алгоритмы тестировались на случайно порождаемых примерах размерности $m = n = 100$ с известными оптимальными решениями. Генерировались матрицы, в которых между любыми двумя единицами в строке нет нулей.

Таблица 2. Результаты численных экспериментов.

№	конструктивная эвристика	имитация отжига	генетический алгоритм	поиск с запретами
1	1	0 (10)	0.001 (9)	0 (10)
2	22.1	0 (10)	0.006 (7)	1.82 (6)
3	54.35	0 (10)	0 (10)	4.73 (6)
4	24.73	0 (10)	0 (10)	1.10 (4)
5	53.8	0 (10)	0 (10)	2.92 (7)
6	63.46	0.23 (8)	0.006 (9)	3.87 (4)
7	4.81	0 (10)	0 (10)	0.01 (9)
8	16.2	0.15 (9)	0.006 (8)	1.20 (5)
9	5.74	0 (10)	0 (10)	0 (10)
10	88	0 (10)	0 (10)	0 (10)

Затем столбцы матриц переставлялись случайным образом. Плотность матриц составляла 5%. Величины w_i выбирались из интервала от 0 до 100 случайно с равномерным распределением.

Критерием остановки метаэвристик было число обращений к процедуре вычисления целевой функции, равное 1 500 000.

Для имитации отжига стартовая температура бралась равной 18, $\gamma = 0{,}99$, $\nu = 20\,000$. Для генетического алгоритма мутации проводились по окрестности *Вставка*. Параметры алгоритма выбирались следующим образом: $K = 10$, $L = 10$, $p_m = 0{,}2$, $p_o = 0{,}05$. Для поиска с запретами длина списка запретов выбиралась равной 30, а мощность рандомизированной окрестности равной 10% от полной окрестности.

В таблице 2 представлены средние значения относительных погрешностей (в процентах), полученные за 10 запусков каждого из алгоритмов по каждому примеру. В скобках указано сколько раз было найдено оптимальное решение.

Все метаэвристики существенно улучшают решение конструктивной эвристики, часто находят оптимальное решение и в среднем имеют малую погрешность.

Выбор наилучшего элемента в каждой квадратичной по мощности окрестности требует $O(nm^3)$ операций. Применение специальных структур данных позволяет понизить эту трудоёмкость до $O(nm^2)$, что существенно сказывается на времени работы метаэвристик.

Дальнейшее повышение эффективности возможно за счёт внедрения элементов искусственного интеллекта. Таким способом можно автоматически настраивать управляющие параметры.

Автор выражает искреннюю благодарность студентам ФИТ НГУ Хмелеву А. В., Сивых М. Г. и Яковлеву А. В. за помощь в проведении численных экспериментов.

Литература

[1] *Veldhorst M.* Approximation of the consecutive ones matrix augmentation problem // SIAM Journal on Computing. — 1985. — V. 14, — Pp. 709–729.

[2] *Booth K. S., Lueker G. S.* Testing for the consecutive ones property, intervals graphs, and graph planarity using PQ-tree algorithm // J. Comput. System. Sci. — 1976. — V. 13. — Pp. 335–379.

[3] *Cheng T. C. E., Diamond J. E., Lin B. M. T.* Optimal scheduling in film production to minimize talent hold cost // Journal of Optimization Theory and Applications, — 1993. — V. 79, N. 3. — Pp. 479–492.

[4] *Кононова П. А., Кочетов Ю. А.* Об одной задаче выбора последовательности столбцов 0-1 матрицы // Труды 14-й Байкальской международной школы-семинара «Методы оптимизации и их приложения», Иркутск, 2008. — Т. 1. — С. 444–451.

[5] *Glover F., Laguna M.* Tabu Search. — Boston: Kluwer Acad. Publ. 1997.

[6] *Černý V.* Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: an efficient simulation algorithm // J. Opt. Theory Appl. — 1985. — V. 45. — Pp. 41–51.

[7] *Kirkpatrick S., Gelatt C. D., Vecchi M. P.* Optimization by simulated annealing // Science. — 1983. — V. 220. — Pp. 671–680.

[8] *Aarts E. H. L., Korst J. H. M., Laarhoven van P. J. M.* Simulated annealing. — Local Search in Combinatorial Optimization. — Chichester: Wiley, 1997. — Pp. 91–120.

[9] *Растригин Л. А.* Случайный поиск — специфика, этапы истории и предрассудки // Вопросы кибернетики. — 1978. — Вып. 33. — С. 3–16.

[10] *Bremermann H. J., Roghson J., Salaff S.* Global properties of evolution processes // Natural automata and useful simulations, London: Macmillan, 1966. — Pp. 3–42.

[11] *Holland J. H.* Adaptation in Natural and Artificial Systems. — Ann Arbor: University of Michigan Press, 1975.

[12] *Goldberg D. E.* Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning. — Reading, MA: Addison-Wesley, 1989.

Трудные тестовые примеры для задач кластеризации и размещения производства*

Кочетова Н. А.
nkochet@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский госуниверситет

Для известных задач кластеризации и размещения производства получены классы тестовых примеров, трудные в вычислительном отношении для нахождения глобального оптимума. Обсуждаются результаты численных экспериментов для метода ветвей и границ и итерационных методов локального поиска.

Difficult test instances for the clustering and facility location problems*

Kochetova N. A.
Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

For the well-known clustering and facility location problems, the computationally difficult test instances for finding global optimum are presented. Experimental results for the branch-and-bound method and iterative local search methods are discussed.

Введение

Разработка трудных тестовых примеров является одним из бурно развивающихся направлений в области экспериментального исследования алгоритмов. Для задач дискретной оптимизации активно используются следующие электронные библиотеки общего назначения:

— Operations Research Library (`http://people.brunel.ac.uk/mastjjb/jeb/info.html`);
— DIMACS Implemetation Challenge (`http://dimacs.rutgers.edu/Challenges`);

а также специализированные библиотеки:

— Project Scheduling Problems Library (`http://www.bwl.uni-kiel.de/Prod/psplib`);
— Quadratic Assignment Problem Library (`http://www.seas.upenn.edu/qaplib/`);
— Library of Locations Algorithms (`http://www.mathematik.uni-kl.de/~lola`) и др.

Библиотека Operations Research Library пользуется наибольшей популярностью и содержит наибольшее количество тестовых примеров по разным моделям исследования операций. В частности, в ней содержатся тесты и для дискретных задач размещения [1]: задачи о покрытии, простейшей задачи размещения, задачи размещения с ограничениями на объемы производства продукции, обобщенной задачи о назначениях и др. К сожалению, многие из этих тестов, за исключением задачи о покрытии множествами, имеют небольшой разрыв целочисленности, то есть линейная релаксация мало отличается по целевой функции от оптимального значения. Исследование оптимизационных алгоритмов на этих тестах не всегда продуктивно. Они создают иллюзию, что даже при большой размерности задачи оптимальное решение может быть найдено сравнительно легко.

Сложность решения многих задач дискретной оптимизации объясняется отчасти наличием большого разрыва целочисленности и огромного числа локальных оптимумов, их непредсказуемым и, фактически, случайным расположением в допустимой области. Принадлежность некоторой задачи к классу NP-трудных задач, по сути, означает отсутствие «простых» правил для нахождения глобального оптимума. Строго доказать несуществование таких правил пока никому не удается. Вместе с тем, современные итерационные методы локального поиска на практике находят оптимальное решение сравнительно легко. Многие из них, например, генетические алгоритмы, вероятностные алгоритмы поиска с запретами, алгоритмы имитации отжига гарантируют в асимптотике получение точного решения задачи (см., например, [2]). Экспериментальные исследования показывают, что оптимум находится достаточно быстро, несмотря на NP-трудность исходной задачи. Правда время от времени мы сталкиваемся с достаточно сложными примерами, которые требуют неожиданно много вычислительных усилий. Такие «крепкие орешки» чрезвычайно важны для экспериментального исследования алгоритмов. Они позволяют выявить слабые стороны численных методов и тем самым указать пути для их дальнейшего совершенствования. В настоящей работе приводится несколько классов таких сложных тестовых примеров для задач кластеризации и размещения производства.

Задача о p-медиане

Введем следующие обозначения:
$I = \{1, \ldots, m\}$ — множество предприятий;
$J = \{1, \ldots, n\}$ — множество клиентов;

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №08-07-00037) и АВЦП Рособразования (проект №2.1.1/3235).

$p \geqslant 1$ — число открываемых предприятий;
$c_{ij} \geqslant 0$ — производственно-транспортные затраты на обслуживание клиента j из предприятия i.

Задача состоит в выборе подмножества $S \subset I$ мощности p, которое позволяет обслужить всех клиентов с минимальными затратами, т. е. найти

$$\min_{S \subset I, |S|=p} \sum_{j \in J} \min_{i \in S} c_{ij}.$$

Сформулированная задача известна в литературе как задача о p-медиане. Она широко используется в кластерном анализе и является NP-трудной в сильном смысле даже в случае, когда матрица (c_{ij}) удовлетворяет неравенству треугольника [3]. Задача не принадлежит классу Apx, и существование приближенного полиномиального алгоритма, гарантирующего относительную погрешность не более $2^{q(m,n)}$, где $q(m,n)$ — произвольный полином от размерности задачи, влечет совпадение классов P и NP [4].

С этой задачей тесно связана простейшая задача размещения, которая может рассматриваться как релаксация предыдущей задачи относительно ограничения $|S| = p$. Пусть величины $f_i \geqslant 0$ задают стоимость открытия предприятий, а непустое подмножество S может быть любым. Простейшая задача размещения состоит в выборе подмножества предприятий, позволяющего обслужить всех клиентов с минимальными суммарными затратами, т. е. найти

$$\min_{S \subseteq I, S \neq \varnothing} \Big\{ \sum_{i \in S} f_i + \sum_{j \in J} \min_{i \in S} c_{ij} \Big\}.$$

Первое слагаемое в целевой функции задает затраты на открытие предприятий. Второе слагаемое определяет производственно-транспортные затраты на обслуживание клиентов.

Для сформулированных задач ниже будут представлены шесть классов тестовых примеров, трудных в вычислительном отношении для нахождения точного решения [5, 6]:

— примеры, использующие конструкцию конечных проективных плоскостей (класс FPP);
— примеры, использующие совершенные коды с расстоянием 3 (класс BPC);
— примеры, базирующиеся на шахматных торах (класс CB);
— три класса примеров с большим разрывом целочисленности (классы GapA, GapB, GapC).

Первый класс является полиномиально разрешимым. Зная способ порождения примеров, легко найти точное решение задачи. Однако для методов локального поиска он оказывается достаточно трудным [7], так как каждому пучку прямых соответствует локальный минимум задачи с большим бассейном притяжения.

Второй и третий классы интересны тем, что число строгих локальных оптимумов для них растет экспоненциально с ростом размерности задачи. Так как по построению любой из них может оказаться глобальным оптимумом, то процесс решения задачи может быть достаточно долгим для любого метода, в том числе и для метаэвристик.

Три класса с большим разрывом целочисленности являются сложными для метода ветвей и границ [6, 8]. Численные эксперименты показывают, что разрыв составляет более 20%, что обуславливает порождение огромного дерева ветвлений с несколькими десятками миллионов вершин даже при небольшой размерности задачи, $n = m = 100$. Самый сложный из этих классов, GapC, является также трудным и для методов локального поиска: вероятностного поиска с запретами, генетического алгоритма и схемы GRASP. Частота нахождения такого решения не превышает 0,53 при выполнении этими алгоритмами 10^4 итераций, соответствующих переходу от текущего решения к соседнему для объединения окрестностей Flip и Swap. Приведем точное описание этих классов.

Легко решаемые примеры

Рассмотрим конечную проективную плоскость порядка k [9]. Она состоит из $n = k^2 + k + 1$ точек $x_1, \ldots, x_n$ и такого же количества прямых $L_1, \ldots, L_n$. Каждая прямая есть набор точек, и $\{0,1\}$-матрица инциденций A задает вхождение точек в состав прямых: $a_{ij} = 1 \Leftrightarrow x_j \in L_i$. Матрица A обладает следующими свойствами:

1) каждая строка содержит ровно $k+1$ единицу;
2) каждый столбец содержит ровно $k+1$ единицу;
3) скалярное произведение любых двух строк равно единице;
4) скалярное произведение любых двух столбцов равно единице.

Такие матрицы существуют, если k — степень простого числа. Множество прямых, проходящих через заданную точку, называется пучком прямых. Мощность каждого пучка равна $k+1$, и пересечение любых двух пучков состоит ровно из одной прямой.

Определим семейство примеров простейшей задачи размещения следующим образом. Положим $I = J = \{1, \ldots, n\}$ и

$$c_{ij} = \begin{cases} \xi_{ij}, & \text{если } a_{ij} = 1; \\ M, & \text{если } a_{ij} = 0; \end{cases}$$

$$f_i = f > \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} \xi_{ij},$$

где ξ_{ij} — случайные числа, взятые из заданного интервала, M — достаточно большое число, $M > nf$. Так как $f > \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} \xi_{ij}$, то оптимальному решению соответствует минимальное число прямых,

покрывающих все точки. Легко проверить, что это пучок. Пучков ровно n, следовательно, оптимальное решение может быть найдено за полиномиальное время. Полагая $p = k + 1$, получаем тестовые примеры для задачи о p-медиане.

Каждому пучку соответствует строгий локальный минимум для окрестностей Flip, Swap и их объединения. Случайные числа ξ_{ij} определяют глобальный оптимум на множестве пучков. Расстояние Хэмминга между этими строгими локальными минимумами ровно $2k$. Значит, диаметр области, где расположены локальные оптимумы, не меньше $2k$ и растет с ростом размерности задачи. Более того, численные эксперименты показывают, что такие строгие локальные минимумы имеют большую зону притяжения, что создает дополнительные трудности для методов локального поиска. Для алгоритма поиска с запретами приходится использовать высокую рандомизацию окрестности или большие списки запретов. Для алгоритмов имитации отжига — высокую стартовую температуру. Если популяция в генетическом алгоритме состоит только из локальных минимумов, соответствующих пучкам прямых, то оператор скрещивания порождает решения с большими значениями целевой функции и процедуры локального спуска с такими стартовыми решениями оказываются малоэффективными. Для вероятностных жадных стратегий (GRASP) это семейство тоже является сложным [7, 10].

Примеры с экспоненциальным числом строгих локальных минимумов

Рассмотрим два класса примеров, в которых число строгих локальных минимумов растет экспоненциально с ростом размерности задачи. Первый класс BPC использует конструкцию совершенных бинарных кодов с расстоянием 3. Второй класс CB — шахматные доски, свернутые в тор.

Обозначим через B^k множество всех 0-1 векторов длины k. Совершенным бинарным кодом с расстоянием 3 называют такое подмножество $C \subset B^k$ мощности $2^k/(k+1)$, что расстояние Хэмминга $d(c_1c_2)$ для любых кодовых слов $c_1, c_2 \in C,\ c_1 \neq c_2$ всегда не меньше трех. Такие коды существуют для $k = 2^r - 1$, где $r > 1$, целое. Построим пример исходных данных по следующему правилу. Положим $n = 2^k,\ I = J = \{1, \ldots, n\}$. Каждому элементу $i \in I$ соответствует вершина $x(i)$ гиперкуба. Пусть $(\xi_{ij}),\ i \in I,\ j \in J$ — некоторая матрица, порожденная, например, случайным образом с элементами из заданного интервала. Положим

$$c_{ij} = \begin{cases} \xi_{ij}, & \text{если } d\big(x(i), x(j)\big) \leqslant 1; \\ M, & \text{в противном случае;} \end{cases}$$

$$f_i = f \geqslant \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} \xi_{ij}.$$

Известно, что любой совершенный бинарный код с расстоянием 3 порождает разбиение гиперкуба на $p = 2^k/(k+1)$ непересекающихся шаров радиуса 1. Такое разбиение соответствует строгому локальному минимуму в задаче о p-медиане с окрестностью Swap. Число совершенных кодов $N(k)$ растет экспоненциально с ростом k и удовлетворяет соотношению [11]

$$\mathcal{N}(k) \geqslant 2^{2^{\frac{k+1}{2}\log_2(k+1)}} \cdot 3^{2^{\frac{k-3}{4}}} \cdot 2^{2^{\frac{k+5}{4}\log_2(k+1)}}.$$

Минимальное расстояние между двумя совершенными кодами (строгими локальными оптимумами) не меньше $2^{(k+1)/2}$, то есть также растет с ростом размерности задачи.

Рассмотрим теперь шахматную доску размером $3k \times 3k,\ k \geqslant 3$, и склеим её границы так, чтобы получился тор. Каждая клетка тора имеет 8 соседних клеток. Например, клетка (1,1) имеет соседей: $(1,2),\ (1,3k),\ (2,1),\ (2,2),\ (2,3k),\ (3k,1),\ (3k,2),\ (3k,3k)$.

Положим $n = 9k^2,\ I = J = \{1, \ldots, n\}$,

$$c_{ij} = \begin{cases} \xi_{ij}, & \text{если клетки } i, j \text{ соседние;} \\ M, & \text{в противном случае;} \end{cases}$$

$$f_i = f \geqslant \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} \xi_{ij}.$$

Каждая клетка вместе с ее соседями образует квадрат 3×3. Тор разбивается на $p = k^2$ таких непересекающихся квадратов. Каждое такое разбиение тора соответствует строгому локальному минимуму в задаче о p-медиане для окрестности Swap. Таких строгих локальных минимумов $2 \cdot 3^{k+1} - 9$. Минимальное расстояние между ними равно $2k$. Таким образом, число строгих локальных минимумов растет экспоненциально с ростом размерности задачи. Минимальное расстояние между ними также возрастает.

Примеры с большим разрывом целочисленности

Известно [12], что разрыв целочисленности для приведенных выше классов BPC, CB, FPP достаточно мал. Метод ветвей и границ [6] находит оптимальное решение достаточно легко. Поэтому представляет интерес построение примеров, которые были бы трудны не только для локальных алгоритмов, но и для точных методов.

Предшествующие классы обладают следующим свойством: в матрице (c_{ij}) каждый столбец и каждая строка имеют одинаковое число *малых* элементов. Обозначим это число через l. Величину l/n назовем плотностью матрицы. Приведем алгоритм построения случайных матриц (c_{ij}) с заданной плотностью (см. Алгоритм 1).

Алгоритм 1. Генератор случайных матриц (l, n).

1: $J \leftarrow \{1, \ldots, n\}$;
2: Column$[j] \leftarrow 0$ для всех $j \in J$;
3: $c[i, j] \leftarrow M$ для всех $i, j \in J$;
4: **для** $i = 1, \ldots, n$
5: $\quad l_0 \leftarrow 0$;
6: $\quad$ **для** $j = 1, \ldots, n$
7: $\quad\quad$ **если** $n - i + 1 = l -$ Column$[j]$ **то**
8: $\quad\quad\quad c[i, j] \leftarrow \xi_{ij}$;
9: $\quad\quad\quad l_0 \leftarrow l_0 + 1$;
10: $\quad\quad\quad$ Column$[j] \leftarrow$ Column$[j] + 1$;
11: $\quad\quad\quad J \leftarrow J \setminus j$;
12: $\quad$ выбрать подмножество $J' \subset J$, $|J'| = l - l_0$ случайным образом и положить $c[i, j] \leftarrow \xi_{ij}$;
13: $\quad$ Column$[j] \leftarrow$ Column$[j] + 1$ для всех $j \in J'$;

Вспомогательный вектор Column$[j]$ содержит текущее значение числа малых элементов в j-м столбце генерируемой матрицы. Идентификатор l_0 используется для подсчета столбцов матрицы, где малые элементы непременно должны быть размещены в i-й строке. Такие столбцы выявляются заранее (строка 7 алгоритма) и удаляются из множества J (строка 11). Заметим, что удаление строк 6–11 из алгоритма позволяет генерировать случайные матрицы, у которых ровно l малых элементов в каждой строке. Транспонированием матрицы можно получить аналогичное свойство для столбцов. Таким образом, получаем три класса тестовых примеров:

GapA: каждый столбец матрицы (c_{ij}) имеет ровно l малых элементов.

GapB: каждая строка матрицы (c_{ij}) имеет ровно l малых элементов.

GapC: каждый столбец и каждая строка матрицы (c_{ij}) имеют ровно l малых элементов.

Для этих классов по прежнему положим $I = J = \{1, \ldots, n\}$, $f_i = f \geqslant \sum\limits_{i \in I} \sum\limits_{j \in J} \xi_{ij}$.

Обозначим через δ разрыв целочисленности:

$$\delta = \frac{F_{\text{opt}} - F_{\text{LP}}}{F_{\text{opt}}} \cdot 100\%,$$

где F_{opt} — оптимальное значение задачи, F_{LP} — значение линейной релаксации [1]. Для $l = 10$, $n = 100$ на классе GapC величина δ оказывается в интервале от 21% до 29%. Как следствие, метод ветвей и границ требует громадного числа итераций, до $0,5 \cdot 10^9$ (см. Таблицу 1), и далеко не всегда находит оптимум за первую половину потраченного времени.

Таблица 1. Характеристики метода ветвей и границ.

Классы	Число итераций	Рекордная итерация	Число смен рекорда
BPC	374 264	371 646	11
CB	138 674	136 236	17
FPP	6 656 713	6 652 295	27
Gap-A	10 105 775	3 280 342	10
Gap-B	30 202 621	14 656 960	22
Gap-C	541 320 830	323 594 521	30

Литература

[1] *Береснев В. Л.* Дискретные задачи размещения и полиномы от булевых переменных. — Новосибирск: Изд-во Инст. математики, 2005. — 408 с.

[2] *Aarts E. H. L., Korst J. H. M., Laarhoven van P. J. M.* Simulated annealing. — Local Search in Combinatorial Optimization. Chichester: Wiley, 1997. — Pp. 91–120.

[3] *Korte B., Vygen J.* Combinatorial Optimization. Theory and Algorithms / Third Edition. — Springer, 2005. — 588 p.

[4] *Кочетов Ю. А., Пащенко М. Г., Плясунов А. В.* О сложности локального поиска в задаче о p-медиане // Дискрет. анализ и исслед. операций. Сер. 2. — 2005. — Т. 12, № 2. — С. 44–71.

[5] *Kochetov Y., Alekseeva E., Levanova T., Loresh M.* Large neighborhood local search for the p-median problem // Yugoslav Journal of Oper. Res. — 2005. — Vol. 15, No. 1. — Pp. 53–63.

[6] *Kochetov Yu., Ivanenko D.* Computationally difficult instances for the uncapacitated facility location problem. In: T. Ibaraki et al. (eds.) Metaheuristics: Progress as Real Solvers. — Springer, 2005. — Pp. 351–367.

[7] *Resende M. G. C., Werneck P. F.* A hybrid multistart heuristic for the uncapacitated facility location problem // European Journal of Oper. Res. — 2006. — Vol. 174. — Pp. 54–68.

[8] *Алексеева Е. В., Кочетов Ю. А., Кочетова Н. А.* Критические параметры простейшей задачи размещения // Труды XIII Байкальской международной школы-семинара. — 2005. — Т. 1. — С. 407–412

[9] *M. Hall Jr.* Combinatorial Theory. Blaisdell. Waltham. MA, 1967.

[10] *Resende M. G. C., Werneck P. F.* A hybrid heuristic for the p-median problem // Journal of Heuristics. — 2004. — Vol. 10. — Pp. 59–88.

[11] *Кротов Д. С.* Нижние оценки числа m квазигрупп порядка 4 и числа совершенных двоичных кодов // Дискрет. анализ и исслед. операций. Сер. 1. — 2000. — Т. 7, № 2. — С. 47–53.

[12] `http://www.math.nsc.ru/AP/benchmarks/` — Электронная библиотека тестовых примеров «Дискретные Задачи Размещения».

Гибридные методы решения сложных комбинаторных задач, использующие декомпозицию*

Плясунов А. В.
apljas@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет

Исследуются методы решения сложных комбинаторных задач, для которых существуют эквивалентные максиминные постановки. Предлагаемые методы основаны на сочетании декомпозиции и метаэвристик.

Hybrid methods using decomposition for the hard combinatorial optimization problems*

Plyasunov A. V.
Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

We study computational methods for the hard combinatorial problems which can be reformulated as maximin problems. These methods combine decomposition techniques and metaheuristics.

Ряд экстремальных задач, которые появились в области интеллектуального анализа данных (data mining) [1], относятся, как и многие другие интересные задачи комбинаторной оптимизации, к классу труднорешаемых задач [2]. При разработке методов их решения возникает, уже ставшая классической, следующая диллема. Если сосредоточиться на построении точных методов, то, как показывает вычислительная практика, такие подходы становятся несостоятельными из-за нехватки ресурсов («проклятие размерности»). С другой стороны, современный опыт построения метаэвристик показывает, что для большинства задач удаётся построить малотрудоёмкие приближённые алгоритмы решения [3, 4]. Однако возникает проблема с оценкой качества таких решений. Гибридные алгоритмы — попытка совместить сильные стороны того и другого направлений решения NP-трудных задач.

Следует заметить, что в настоящее время отношения между теорией экстремальных задач и задачами анализа данных и распознавания образов не сводятся к тому, что первая из них — поставщик методов решения для второй. Концепции и идеи, используемые в области интеллектуального анализа данных, оказываются полезными при разработке метаэвристик нового типа для решения комбинаторных задач [5]. Более того, эти метаэвристики могут быть использованы в гибридных алгоритмах, предлагаемых ниже.

В настоящей работе описывается подход к разработке гибридных методов, который оформился в работах [6, 7]. Он основывается на использовании декомпозиции при разработке точных алгоритмов решения. Здесь имеется в виду не классические подходы — декомпозиция Бендерса или декомпозиция Данцига-Вулфа [8–10], а скорее декомпозиция как метод решения максиминных или минимаксных задач. Различие заключается в том, что классический подход ориентирован на выявление структурных особенностей решаемых задач с последующим использованием этих особенностей и подходящего механизма генерации строк или столбцов. В рассматриваемом случае нет таких структурных особенностей и нетривиального механизма генерации переменных и ограничений. Роль метаэвристик в предлагаемой алгоритмической схеме не сводится только к построению хороших нижних оценок для задачи на максимум. Они, помимо всего прочего, являются источником семейства решений, используемых в релаксированной координирующей задаче. То есть метаэвристики дополняют так или иначе механизм генерации в рассматриваемых задачах.

Декомпозиция и максиминные задачи

Сформулируем в общем виде метод декомпозиции применительно к максиминным задачам. Аналогичные построения и рассуждения верны и для минимаксных задач. С этой точки зрения декомпозицию Бендерса можно рассматривать как сведение исследуемой задачи к эквивалентной максиминной задаче (координирующая задача или master problem в классической формулировке [8]) с последующим применением модифицированного варианта описываемого далее метода декомпозиции. Поскольку, в последнем отсутствует механизм генерации нарушенных ограничений, то идея модификации заключается во встраивании эффективного механизма генерации строк, использующего структурные особенности исследуемой задачи. Фактически в [8] при описании обобщённой декомпозиции Бендерса неявно используется подобный метод. Так как нетривиальный метод генерации

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 09–06–00032, целевой программы АВЦП Рособразования проект № 2.1.1/3235.

строк предусмотрен там изначально, то и не возникала необходимость в разделении собственно метода декомпозиции и остального инструментария.

Рассмотрим следующую максиминную задачу:

$$z = \max_{x\in X}\min_{y\in Y} R(x,y).$$

В дальнейшем будем предполагать, что хотя бы одно из множеств X или Y конечно и задача разрешима. Перепишем её в эквивалентном виде, который обычно используется при описании декомпозиции Бендерса:

$$\gamma \to \max_{\gamma, x\in X};$$
$$\gamma \leqslant R(x,y), \quad y \in Y.$$

Сформулируем метод декомпозиции для максиминной задачи. Пусть $\bar{Y} \subseteq Y$.

Шаг 1: Решить релаксированную задачу

$$\bar{z} = \max_{\gamma, x\in X} \gamma;$$
$$\gamma \leqslant R(x,y), \quad y \in \bar{Y}.$$

Пусть x^* — её оптимальное решение.

Шаг 2: Решить подзадачу

$$\underline{z} = \min_{y\in Y} R(x^*, y).$$

Пусть y^* — её оптимальное решение.

Шаг 3: Если $\bar{z} = \underline{z}$, то стоп. Иначе $\bar{Y} := \bar{Y} \cup y^*$ и вернуться на Шаг 1.

Если на шагах 1 и 2 существуют оптимальные решения x^* и y^*, то $\underline{z} \leqslant z \leqslant \bar{z}$. При этом генерируемая методом последовательность $\bar{z}$ является невозрастающей. Если на шаге 3 выполняется условие $\bar{z} = \underline{z}$, то $z = \bar{z} = \underline{z}$ — искомое оптимальное значение максиминной задачи, а (x^*, y^*) — её оптимальное решение. Для упрощения анализа этого метода будем предполагать, что разрешима любая релаксированная задача, возникающая на шаге 1. Аналогично, будем считать, что разрешима любая подзадача на шаге 2. Тогда очевидно, что описываемый метод конечен, если на шагах 1 или 2 повторяются оптимальные решения. По-видимому, впервые это было отмечено в [8]. Там же доказано, что если одно из множеств X и/или Y конечно, то конечен и метод. В этом случае также можно отказаться от требования, что всегда разрешимы задачи, возникающие на шагах 1 и 2. Чтобы гарантировать корректную работу алгоритма, будем считать, что в случае неразрешимости задачи на шаге 1 генерируется вектор $x^* \in X$, который не встречался на предыдущих итерациях. Аналогично поступаем, если неразрешима подзадача на шаге 2.

Важным при реализации этого метода является выбор начального семейства решений $\bar{Y}$. Из описания метода следует, что если множество X конечно, то вне зависимости от того, конечно или бесконечно множество Y, предлагаемый метод является точным и конечным. Поэтому возникает проблема отыскания такого начального множества $\bar{Y}$, которое позволяет быстро найти оптимальное решение исследуемой задачи. Впервые эта проблема была сформулирована в [6-7]. В этой работе генетический локальный поиск использовался для генерации начального множества ограничений при решении известной задачи о $(r|p)$-центроиде. В настоящей работе подчеркивается возможность применения и других метаэвристик для выбора начального семейства $\bar{Y}$.

Гибридный алгоритм для одной задачи ценообразования

В рассматриваемой задаче первым принимает решение производитель, который устанавливает цены на каждом из своих предприятий, выпускающих однородную продукцию. Затем каждый из потребителей выбирает то предприятие, на котором транспортные затраты и затраты на приобретение продукции в сумме минимальны. Покупка совершается в том случае, когда это позволяет бюджет потребителя. Требуется определить такие цены на каждом предприятии, при которых доход производителя максимален. Введем обозначения:

$I = \{1, \ldots, n\}$ — множество предприятий;
$J = \{1, \ldots, m\}$ — множество потребителей;
$b_j \geqslant 0$ — бюджет j-го потребителя;
$c_{ij} \geqslant 0$ — матрица транспортных затрат.

Переменные задачи:
$p_i \geqslant 0$ — цена товара на i-м предприятии;

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i\text{-е предприятие обслуживает} \\ & j\text{-го потребителя,} \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Запишем задачу в виде следующей задачи квадратичного программирования (P):

$$\max_{p,x} \sum_{i\in I} p_i \sum_{j\in J} x_{ij};$$
$$p_i \geqslant 0, \quad i \in I;$$
$$\sum_{i\in I} (b_j - c_{ij} - p_i) x_{ij} \geqslant 0, \quad j \in J;$$
$$\sum_{i\in I} (c_{ij} + p_i) x_{ij} \leqslant c_{kj} + p_k, \quad k \in I,\ j \in J;$$
$$\sum_{i\in I} x_{ij} \leqslant 1, \quad j \in J;$$
$$x_{ij} \in \{0,1\}, \quad i \in I,\ j \in J.$$

Известно, что данная задача является NP-трудной в сильном смысле [11].

Чтобы получить точный алгоритм на основе метода предыдущего раздела, воспользуемся понятием проекции оптимизационной задачи [8]. Рассмотрим следующую функцию возмущения:

$$\rho(x) = \max_{p\geqslant 0} \sum_{i\in I} p_i \sum_{j\in J} x_{ij};$$
$$\sum_{i\in I} (b_j - c_{ij} - p_i)x_{ij} \geqslant 0, \quad j \in J;$$
$$\sum_{i\in I} (c_{ij} + p_i)x_{ij} \leqslant c_{kj} + p_k, \quad k \in I,\ j \in J.$$

Используя функцию $\rho(x)$, получим проекцию задачи P на пространство переменных x:

$$\max_x \ \rho(x);$$
$$\sum_{i\in I} x_{ij} \leqslant 1,\ j \in J;$$
$$x_{ij} \in \{0,1\}; \quad i \in I,\ j \in J.$$

Задача P и её проекция эквивалентны. Это означает, что если (p^*, x^*) — оптимальное решение задачи P, то x^* — оптимальное решение проекции. И, наоборот, если x^* — оптимальное решение проекции, то, взяв в качестве p^* любое p, на котором достигается максимум величины $\rho(x^*)$, получим оптимальное решение (p^*, x^*) исходной задачи.

Вводя двойственные переменные $t \geqslant 0$ и $z \geqslant 0$, запишем функцию возмущения в следующем виде:

$$\rho(x) = \min_{t\geqslant 0, z\geqslant 0} \max_{p\geqslant 0} \Bigg\{ \sum_{i\in I} p_i \sum_{j\in J} x_{ij} + \sum_{i\in I}\sum_{j\in J} t_j\big(b_j - c_{ij} - p_i\big)x_{ij} + \sum_{k\in I}\sum_{j\in J} z_{kj}\Bigg(c_{kj} + p_k - \sum_{i\in I}(c_{ij} + p_i)x_{ij}\Bigg)\Bigg\}.$$

Учитывая, что внутренний максимум по p можно представить в виде

$$\delta(x,t,z) + \sum_{i\in I} \max_{p_i\geqslant 0}\big\{\delta_i(x,t,z)p_i\big\},$$

где:

$$\delta(x,t,z) = \sum_{j\in J} t_j\Bigg(\sum_{i\in I}\big(b_j - c_{ij}\big)x_{ij}\Bigg) + \sum_{k\in I}\sum_{j\in J} z_{kj}\Bigg(c_{kj} - \sum_{i\in I} c_{ij}x_{ij}\Bigg);$$

$$\delta_i(x,t,z) = \sum_{j\in J} x_{ij} - \sum_{j\in J} t_j x_{ij} - \sum_{k\in I}\sum_{j\in J} z_{kj}x_{ij} + \sum_{j\in J} z_{ij},$$

получим:

$$\rho(x) = \min_{t\geqslant 0, z\geqslant 0}\Big\{\delta(x,t,z) + \sum_{i\in I} \max_{p_i\geqslant 0}\big\{\delta_i(x,t,z)p_i\big\}\Big\}.$$

Следовательно, задача P эквивалентна следующей максиминной задаче:

$$\max_{y,x_{ij}} y; \tag{1}$$
$$y \leqslant \delta(x,t,z) + \sum_{i\in I} \max_{p_i\geqslant 0}\{\delta_i(x,t,z)p_i\}, \forall t, z \geqslant 0; \tag{2}$$
$$\sum_{i\in I} x_{ij} \leqslant 1, \quad j \in J; \tag{3}$$
$$x_{ij} \in \{0,1\}, \quad i \in I,\ j \in J. \tag{4}$$

Таким образом, можно применить метод декомпозиции и, как следует из предыдущего раздела, получить точный алгоритм решения задачи P. Так как цель заключается в разработке более мощного — гибридного алгоритма, то дополним схему дополнительным шагом, на котором с помощью генетического локального поиска строится для задачи P семейство приближённых решений (p^l, x^l), $l = 1, \ldots, q$ [11]. Затем для каждого из полученных решений x^l, $l = 1, \ldots, q$, вычисляется значение функции возмущения. Так как это можно сделать с помощью симплекс-метода, то получим семейство оптимальных двойственных оценок (t^l, z^l), $l = 1, \ldots, q$, которое и будет играть роль множества $\bar{Y}$ в реализации метода для задачи P. Приведём описание алгоритма.

Шаг 1: Построить, как описано выше, начальное семейство двойственных оценок (t^l, z^l), $l = 1, \ldots, q$. Положить $LBD = \max\limits_{l=1,\ldots,q} \rho(x^l)$.

Шаг 2: Решить релаксированную задачу:

$$\max_{y,x} y;$$
$$y \leqslant \delta(x, t^s, z^s) + \sum_{i\in I} \max_{p_i\geqslant 0}\{\delta_i(x, t^s, z^s)p_i\}, \quad s = 1, \ldots, q,\ i \in I;$$
$$\sum_{i\in I} x_{ij} \leqslant 1, \quad j \in J;$$
$$x_{ij} \in \{0,1\}, \quad i \in I,\ j \in J.$$

Пусть $(\bar{x}, \bar{y})$ — оптимальное решение. Тогда $\bar{y}$ — верхняя оценка на оптимальное решение задачи P.

Шаг 3: Решить подзадачу $\rho(x)$ с $x = \bar{x}$.

Шаг 4: Если $\rho(\bar{x}) = \bar{y}$, то стоп. Нашли оптимальное решение исходной задачи. Иначе положить: $q := q + 1$, $t^q := t$, $z^q := z$, где t и z — оптимальные двойственные переменные, соответствующие оптимальному решению, на котором достигается значение $\rho(\bar{x})$.

Если $\rho(\bar{x}) > LBD$, то $LBD := \rho(\bar{x})$ — новая нижняя граница. Возвращаемся на Шаг 2.

Из описания метода декомпозиции в первом разделе следует, что приведённый алгоритм решения задачи P конечен. Таким образом, из бесконечного множества ограничений (2) координирующей

задачи (1)–(4) в приведённом алгоритме используется лишь конечное число ограничений. То есть «почти все» ограничения вида (2) являются несущественными ограничениями. Назначение шага 1 заключается в том, чтобы отгадать такое семейство ограничений (2), которое позволило бы быстро найти оптимум задачи.

Вычисление такого семейства представляется сложной проблемой, которая потребует как теоретических, так и экспериментальных исследований. Успех в любом из этих направлений позволит расширить границы применимости подобных методов. Одной из особенностей предлагаемого алгоритма является статический характер применения генетического локального поиска. Он используется для порождения начального семейства ограничений и больше не участвует в работе алгоритма. На последующих итерациях алгоритма происходит лишь увеличение этого семейства.

Заключение

В настоящей работе предложен точный декомпозиционный метод, развивающий идеи из работ [6, 7]. Интересны модификации этого подхода, в которых по определённым принципам происходит уменьшение семейства ограничений вида (2), с последующим его пополнением с помощью методов локального поиска. Если воспользоваться аналогией из области разработки алгоритмов на основе метаэвристик, то необходимо разработать процедуры интенсификации и диверсификации, позволяющие ускорить получение относительно небольших семейств ограничений вида (2).

Литература

[1] *Кельманов А. В.* NP-полнота некоторых задач поиска подмножеств векторов // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. — 2010. — Т. 16, №3. — (принята в печать).

[2] *Ausiello G., Crescenzi P., Gambosi G., Kann V., Marchetti-Spaccamela A., Protasi M.* Complexity and approximation: combinatorial optimization problems and their aproximability properties — Berlin: Springer-Verlag, 1999. — 524 p.

[3] *Rebeiro C.,C., Hansen P.* Essays and surveys in metaheuristics — Boston: Kluwer Academic Publishers, 2002. — 651 p.

[4] *Плясунов А. В.* О вычислительных возможностях метаэвристик // Российская конференция «Дискретная оптимизация и исследование операций», Владивосток, 7–14 сентября 2007 г., Новосибирск: Издательство Института математики, — 2007. — С. 284–285.

[5] *Plastino A., Fonseca E. R., Fuchshuber R., Martins S. L., Freitas A. A., Luis M., Salhi S.* A hybrid data mining metaheuristic for the p-median problem // Proc. of the Ninth SIAM International Conference on Data Mining (SDM-2009), Sparks, Nevada, USA, April 30 - May 2, 2009. — 305-316 P.

[6] *Alekseeva E. V., Kochetova N. A., Kochetov Yu. A., Plyasunov A. V.* Hybrid Memetic Algorithm for the Competitive p-Median Problem // Preprints of the 13th IFAC Symposium on Information Control Problems in Manufacturing, Moscow, Russia, June 3–5, 2009. — 5 P.

[7] *Alekseeva E. V., Kochetova N. A., Kochetov Yu. A., Plyasunov A. V.* A heuristic and exact methods for the dicrete $(r|p)$-centroid problem // LNCS, Berlin: Springer, 2010.— V. 6022, — Pp. 11–22.

[8] *Geoffrion A. V.* Generalized Benders decomposition // Journal of optimization theory and application. — 1972. — Vol. 10, No. 4. — Pp. 237–260.

[9] *Vanderbeck F., Wolsey L. A.* Reformulation and decomposition of integer programs // CORE DP — 2009. — Vol. 16. — 49 P.

[10] *Lübbecke M. E., Desrosiers J.* Selected topics in column generation // Operations research — 2005. — Vol. 53, No. 6. — Pp. 1007–1023.

[11] *Панин А. А.* Генетический алгоритм для одной задачи ценообразования // Труды ИВМиМГ СО РАН серия Информатика. — 2009. — Вып. 9. — С. 190–196.

Об оценках вычислительной сложности метода ветвей и границ в задаче о сумме подмножеств*

Посыпкин М. А.
mposypkin@mail.ru
Москва, Институт системного анализа РАН

Рассматривается задача о сумме подмножеств. Получены верхние и нижние оценки вычислительной сложности метода ветвей и границ решения этой задачи. Проведено сравнение с другими известными оценками.

On computational complexity estimates of branch-and-bound method for solving subset-sum problem*

Posypkin M. A.
Institute for Systems Analysis RAS

The subset sum problem is considered. Upper and lower computational complexity estimates for solving this problem are obtained. These estimates are compared with other known estimates for this problem.

В работе рассматривается частный случай задачи о ранце — задача о сумме подмножеств [1]. Одним из основных методов, применяемых для решения этой задачи, является метод ветвей и границ (МВГ).

Особенностью метода ветвей и границ является то, что трудоемкость решения задачи этим методом существенно зависит от входных данных задачи. В частности, в [2] приведен пример задачи, сложность решения которого, определяемая числом рассматриваемых в процессе решения подзадач, имеет порядок $\frac{2^n}{\sqrt{n}}$. В то же время существует тривиальный пример задачи о ранце произвольной размерности, для решения которой требуется один шаг МВГ. Поэтому важным является получение оценок сложности решения задачи, зависящих от ее входных данных (коэффициентов). Такие оценки позволяют сделать определенные выводы о трудоемкости задачи, не решая ее.

В настоящей работе для задачи о сумме подмножеств получены верхняя и нижняя оценки сложности ее решения методом ветвей и границ, зависящие от входных данных задачи.

Постановка задачи

Рассмотрим одну из задач дискретной оптимизации — задачу *о сумме подмножеств* [1]:

$$\begin{cases} f(x) = \sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i \to \max; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i \leqslant C; \\ x_i \in \{0,1\}, \;\; i = 1, \ldots, n. \end{cases} \tag{1}$$

Задачу (1) будем называть *невырожденной*, если для любого набора значений булевых переменных $x_1, \ldots, x_n$ сумма $\sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i$ не равна C. Задача о сумме подмножеств является частным случаем задачи о ранце, когда веса и стоимости предметов совпадают.

Рассмотрим стандартный вариант метода ветвей и границ, применяемый для численного решения задачи о ранце. В процессе работы алгоритма поддерживаются следующие данные: *рекорд*, т. е. наибольшее найденное на данный момент времени значение целевой функции f, *рекордное решение*, на котором достигается рекорд, и текущий список *подзадач*, на которые разбита исходная задача. Подзадачи из списка являются задачами следующего вида:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i \to \max; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i \leqslant C; \\ x_i = \theta_i, \;\; i \in I, \;\; \theta_i \in \{0,1\}; \\ x_i \in \{0,1\}, \;\; i \in N \setminus I, \end{cases} \tag{2}$$

где I — множество индексов всех переменных x_i, принимающих фиксированные значения θ_i, а $N = \{1, \ldots, n\}$. В процессе решения поддерживается список подзадач $\mathcal{L}$, который в начальный момент содержит только один элемент — исходную задачу. На каждом шаге в методе ветвей и границ производятся следующие действия.

1. Если список задач-кандидатов $\mathcal{L}$ пуст, то программа завершается.
2. Выбирается элемент $P \in \mathcal{L}$.
3. Для выбранной подзадачи P производится проверка *правил отсева*, приводимых далее в работе. Если хотя бы одно из правил выполнено, то подзадача исключается из дальнейшего рассмотрения и выполняется переход к пункту 1. При необходимости на этом шаге также обнов-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 10-07-00301, 09-07-00352.

ляются рекорд и соответствующее рекордное решение.

4. Подзадача P разбивается на несколько новых подзадач, которые добавляются к списку $\mathcal{L}$ и выполняется переход к пункту 1.

Результатом работы алгоритма является окончательное рекордное решение.

Разбиение подзадачи выполняется следующим образом. Выбирается переменная x_b, называемая *переменной ветвления*. Подзадача P вида (2) разбивается на две подзадачи P_0 и P_1, получаемые присваиванием переменной x_b значений 0 и 1 соответственно:

подзадача P_0:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i \to \max; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i \leqslant C; \\ x_i = \theta_i, \;\; i \in I, \;\; x_b = 0; \\ x_i \in \{0,1\}, \;\; i \in N \setminus \{I \cup b\}, \end{cases}$$

подзадача P_1:

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i \to \max; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} w_i x_i \leqslant C; \\ x_i = \theta_i, \;\; i \in I, \;\; x_b = 1; \\ x_i \in \{0,1\}, \;\; i \in N \setminus \{I \cup b\}. \end{cases}$$

Правила отсева применяются для сокращения перебора. В стандартном варианте метода ветвей и границ для задачи о ранце подзадачи отсеиваются, если превышено ограничение по весу, либо линейная оценочная задача имеет решение, не превосходящее рекорд [1]. Оценочная задача получается заменой условия булевости $x_i \in \{0,1\}$ условием $0 \leqslant x_i \leqslant 1$ для всех $i \in N$. В работе [5] доказано, что для невырожденной задачи о сумме подмножеств перечисленные условия отсева сводятся к следующим двум условиям:

1) $\sum\limits_{i \in I} w_i \theta_i \geqslant C$;

2) $\sum\limits_{i \in I} w_i (1 - \theta_i) \geqslant R$;

где $W = \sum\limits_{i=1}^{n} w_i, \;\; R = W - C$.

Графически процесс работы метода ветвей и границ можно представить в виде дерева, называемого *деревом ветвлений*, рис. 1. Вершинам дерева соответствуют подзадачи, получаемые в результате ветвления, а дуги соединяют данную подзадачу с подзадачами, полученными из нее в результате ветвления. Будем обозначать черным цветом

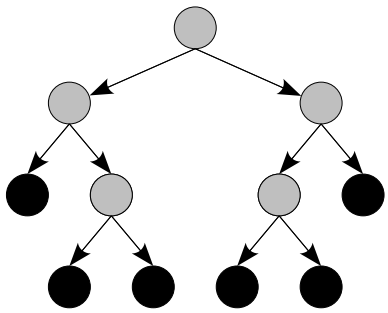


Рис. 1. Дерево ветвлений.

подзадачи, исключенные из дальнейшего процесса поиска по правилам отсева, серым цветом — подзадачи, подвергнутые ветвлению. Будем нумеровать ярус дерева, начиная с нуля. Таким образом, число ярусов, на которых находится заданная вершина, соответствует числу фиксированных переменных соответствующей подзадачи.

Верхняя и нижняя оценки сложности МВГ для задачи о сумме подмножеств

Сложностью решения задачи вида (1) методом ветвей и границ будем называть число итераций цикла 1–4 в МВГ, которые необходимо выполнить для решения этой задачи. Сложность совпадает с общим числом вершин в дереве ветвлений. Работа приведенного выше алгоритма существенным образом зависит от процедуры выбора очередной подзадачи из списка подзадач и процедуры выбора переменной ветвления для разбиения выбранной подзадачи. В данной работе рассмотрим случай, когда веса упорядочены по убыванию ($w_1 \geqslant \ldots \geqslant w_n$) и переменные ветвления выбираются в порядке их следования. Выбор очередной подзадачи для разбиения может быть произвольным.

Введем следующие обозначения:

$$s_k(z) = \max_{i=1,\ldots,k} \sum_{j=1}^{i} w_j < z;$$

$$t_k(z) = \max_{i=1,\ldots,k} \sum_{j=k-i+1}^{k} w_j < z,$$

где z — произвольное положительное число. Приведем без доказательства следующее утверждение.

Лемма 1. *Число L_k «серых» вершин на ярусе k, $1 \leqslant k \leqslant n$, в дереве ветвлений для невырожденной задачи о сумме подмножеств удовлетворяет неравенству:*

$$\sum_{i=k-s_k(R)}^{s_k(C)} \binom{k}{i} \leqslant L_k \leqslant \sum_{i=k-t_k(R)}^{t_k(C)} \binom{k}{i}.$$

В этой лемме и далее полагается $\binom{n}{0} = 1$ и $\sum_{i=a}^{b}(\ldots) = 0$ при $a > b$.

В дереве ветвлений, соответствующем полностью решенной задаче, присутствуют вершины двух типов: «серые» (внутренние) и «черные» (концевые). Общее число вершин при этом выражается формулой $2L+1$, где L — суммарное число «серых» вершин, вычисляемое по формуле $L = 1 + \sum_{i=1}^{n-1} L_k$. Поэтому справедлива следующая

Теорема 2. *Сложность S решения невырожденной задачи (1) с n булевыми переменными удовлетворяет неравенствам:*

$$2\sum_{k=1}^{n-1}\underline{L_k} + 3 \leqslant S \leqslant 2\sum_{k=1}^{n-1}\overline{L_k} + 3, \qquad (3)$$

где

$$\underline{L_k} = \sum_{i=k-s_k(R)}^{s_k(C)}\binom{k}{i}, \qquad \overline{L_k} = \sum_{i=k-t_k(R)}^{t_k(C)}\binom{k}{i}.$$

Другие оценки сложности

В работе [2] приводится пример задачи о сумме подмножеств, сложность решения которой методом ветвей и границ составляет $\varphi(n) = 2\binom{n+1}{\lfloor n/2\rfloor+1} + 1$, где n — число переменных задачи. В работе [3] показывается, что эта величина является верхней оценкой в случае, когда переменные ветвления выбираются в порядке убывания весов. В работе [4] показано, что при другом варианте выбора переменной для ветвления верхняя оценка может быть выше. Оценка $\varphi(n)$ не зависит от коэффициентов задачи и для большинства задач является сильно завышенной. В работе [5] получены следующие верхние и нижние оценки для задачи о сумме подмножеств, зависящие от коэффициентов:

$$S \geqslant \binom{n+1-t_n(C)+s_n(C)}{s_n(C)+1};$$
$$S \leqslant \binom{n+1-s_n(C)+t_n(C)}{t_n(C)+1}. \qquad (4)$$

Несложно показать, что полученные в работе оценки (3) точнее оценок (4) для любой задачи. Оценка $\varphi(n)$ точнее по отношению к верхней оценке (3) для примеров, в которых ограничение C приблизительно равняется половине суммарного веса предметов. В то же время, для задач, в которых C мало по отношению к W, либо, наоборот, близко к этой величине, оценка (3), как правило, намного точнее.

Выводы

В работе рассмотрены оценки сложности решения задачи о сумме подмножеств методом ветвей и границ. В дальнейших исследованиях планируется провести экспериментальное и теоретическое исследование точности полученных оценок.

Литература

[1] *Kellerer H., Pfershy U., Pisinger D.* Knapsack Problems. — Springer Verlag, 2004. — 546 p.

[2] *Финкельштейн Ю. Ю.* Приближенные методы и прикладные задачи дискретного программирования. — М.: Наука, 1976.

[3] *Гришухин В. П.* Эффективность метода ветвей и границ в задачах с булевыми переменными // Исследования по дискретной оптимизации, 1976. — С. 203–230.

[4] *Колпаков Р. М., Посыпкин М. А.* Асимптотическая оценка сложности метода ветвей и границ с ветвлением по дробной переменной для задачи о ранце // Дискретн. анализ и исслед. опер. — Т. 15, № 1. — 2008. — С. 58—81.

[5] *Колпаков Р. М., Посыпкин М. А.* Верхняя и нижняя оценки трудоемкости метода ветвей и границ для задачи о ранце // Дискретная математика. — Т. 22, вып. 1. — 2010. — С. 58–73.

О линейных соотношениях для задачи 3-ВЫПОЛНИМОСТЬ

Файзуллин Р. Т., Дулькейт В. И., Хныкин И. Г.
r.t.faizullin@mail.ru, vidulkeyt@mail.ru, hig82@rambler.ru
Омск, Омский государственный технический университет

В работе установлена аналогия между задачей ВЫПОЛНИМОСТЬ и основными задачами линейной алгебры. Показано, что задача ВЫПОЛНИМОСТЬ может быть сведена к системе линейных алгебраических уравнений с симметричной матрицей. Доказана теорема о соответствии минимума функционала специального вида, относительно неизвестных коэффициентов разложения по базису собственных векторов решению задачи 3-ВЫПОЛНИМОСТЬ. Предложен эвристический тест вероятностного определения значимого числа битов (до трети) решения задачи факторизации.

About linear equations for 3-SAT problem

Faizullin R. T., Dulkeyt V. I., Khnikin I. G.
Omsk State Technical University, Omsk, Russia

The article proposes analogy between SAT problem and general problems of linear algebra. It is shown that SAT problem can be reduced to the system of linear equations with symmetric matrix. The theorem about correspondence between minimum of associated special formed functional and decision of 3-SAT problem was proven. Heuristic probability based test for determination of the decision components was suggested.

Введение

Задача ВЫПОЛНИМОСТЬ (SAT) [1] — одна из наиболее интересных задач математической логики и теории сложности, она является фундаментальной для решения многих проблем искусственного интеллекта, проектирования компьютерных систем, роботостроения, криптографии и других.

После классической работы Кука [1], где была доказана базовая роль задачи ВЫПОЛНИМОСТЬ в классе NP и введено понятие NP-полноты, усилия многих исследователей были направлены на построение эвристических алгоритмов решения КНФ. К сожалению, оказалось, что во многих практически важных случаях, переборные по своей сути алгоритмы не могут решать задачи высокой размерности и представляется необходимым привлечение методов математического анализа и вычислительной математики.

Целью данной работы является попытка установления связи между задачей ВЫПОЛНИМОСТЬ и эффективными методами вычислительной линейной алгебры.

Теоретическая часть

Пусть $L(x)$ — пропозициональная формула в конъюнктивной нормальной форме на множестве булевых переменных $x \in B^N\{0,1\}$. Задача ВЫПОЛНИМОСТЬ заключается в том, чтобы найти решающий набор x_0, такой, что $L(x_0) =$ ИСТИНА, или доказать, что решающего набора не существует.

Рассмотрим без потери общности [2] переход от задачи 3-ВЫПОЛНИМОСТЬ к задаче решения систем линейных алгебраических уравнений. Пусть дана КНФ:

$$L(x) = \prod_{i=1}^{M} C_i, \tag{1}$$

где C_i — дизъюнкции вида $\vee q_{ij}$. Здесь $q_{ij} = x_j$ или $q_{ij} = \bar{x}_j$.

Отметим, что каждой дизъюнкции можно поставить в соответствие уравнение, связывающее уже вещественные переменные. В правой части стоят единицы, а переход от булевых переменных к вещественным осуществляется согласно формулам: $x_j \to y_j,\ \bar{x}_j \to 1 - y_j$. В этом случае мы получаем систему линейных алгебраических уравнений:

$$Ay = f. \tag{2}$$

Обратим внимание на то очевидное обстоятельство, что правая часть f_j равна количеству q_{ij}, принимающих значение «ИСТИНА» в исходной КНФ.

Естественно, если мы не знаем выполняющий набор, то правая часть (2) нам тоже не известна. Но мы можем рассмотреть частные случаи, когда компоненты правой части равны наперед заданному вектору констант, например, одной из констант из кортежа $1, 2, 3$.

Предположим, что вектор f нам известен, например, $f_j = 2$ для всех j, и рассмотрим вопрос, существует ли решение (2), компоненты которого равны 0 или 1? Систему можно преобразовать согласно формуле:

$$RAy = Bf = Rf, \tag{3}$$

где R в общем случае — произвольная прямоугольная матрица размера $N \times M$. Например, в качестве R можно выбрать A^{T}, но как легко показать,

это не гарантирует нам определенности и разреженности итоговой квадратной матрицы.

Попытаемся построить матрицу B таким образом, чтобы не потерять определенность, присущую исходной задаче и главное, получить в итоге симметричную матрицу. Рассмотрим переменную с индексом j и соответствующие ей уравнения в (1). Будем складывать эти уравнения, аккумулируя неизвестные в j-ой строке B, умножая их на -1, если переменная входит в уравнение со знаком минус. Конечно, это не гарантирует нам определенности итоговой матрицы, но позволяет не потерять разреженности структуры, присущей A. Тогда верна следующая

Лемма 1. *Итоговая матрица B симметрична.*

Приведем схему доказательства: будем рассматривать логическое уравнение k, содержащее переменные y_j и y_i. Тогда справедливы следующие рассуждения относительно вкладов в j-ю и i-ю строки матрицы B: если y_j, y_i входят в k-е уравнение со знаком плюс, то модификация коэффициентов происходит следующим образом: $1 \to b_{jj}$, $1 \to b_{ji}$; и, соответственно, $1 \to b_{ii}$, $1 \to b_{ij}$. Рассуждая аналогично для остальных комбинаций знаков y_j, y_i, убеждаемся в справедливости утверждения леммы.

Определенность матрицы не предполагается, и на самом деле, очевидно, что при $M \lessapprox N$ возможно несколько решений, т. е. B может быть вырождена, даже если целочисленное решение существует и единственно. С другой стороны, получив какое-то целочисленное решение для системы (3) с вырожденной матрицей B, мы не можем гарантировать, что данное решение удовлетворяет (2).

Если определитель итоговой матрицы не равен нулю, то единственное целочисленное решение может быть решением (2), что непосредственно проверяется для уравнений из системы (2).

Какой смысл имеет фиксированная правая часть, компоненты которой равны константе? Обратим внимание на то, что КНФ можно рассматривать как релейную схему с N входами, M элементами ИЛИ, и одним выходом. Тогда правая часть, равная константе 2, гарантирует срабатывание релейной схемы при случайном инвертировании сигнала, входящего в один из элементов ИЛИ.

Рассмотрим случай, когда нам неизвестна правая часть. Оказывается, что и в этом случае, исходя только из структуры матрицы, можно получить некоторую информацию о решении.

Обозначим через g^2 вектор правой части, получающийся при преобразовании f в g, когда $f_i = 2$ для всех i. Неизвестный в общем случае вектор g можно представить в виде $g^2 + \Delta g$, т. е. как сумму вектора, отвечающего константам, и вектора «возмущения». Очевидно, что в этом случае $f_j = 2 \pm 1$.

Попытаемся оценить норму вектора возмущения Δg относительно вкладов в g^2 от $f_j = 2$. Компоненты вектора Δg получаются суммированием всех дизъюнкций, содержащих литерал j, и сложение можно организовать дихотомически, поднимаясь по двоичному дереву к вершине-сумме. Рассмотрим все случаи суммирования на самом нижнем уровне. При попарной аккумуляции логических уравнений правые части могут складываться одним из следующих способов:

$$(2+1)+(2+1), \quad (2+1)+(2-1),$$
$$(2+1)-(2+1), \quad (2+1)-(2-1).$$

Будем считать эти случаи равновероятными (например, данное предположение оправданно для случайно сформированных КНФ), и попытаемся определить, насколько в среднем меняется компонента g_j по сравнению с компонентой g_j^2.

Очевидно, что математическое ожидание возмущения будет равно $1/2 + 0 + 0 + 1/2 = 1$, тогда как значение невозмущенной правой части равно 2. Можно сделать заключение о том, что «возмущение» действительно можно трактовать как возмущение, в среднем сравнимое, и вдвое меньшее по норме, чем исходный вектор g^2.

Рассмотрим максимальные компоненты вектора-решения $\bar{y}$ системы (3) с правой частью g^2, т. е. те компоненты, которые существенно превышают единицу. Понятно, что неизвестное возмущение Δg корректирует компоненты вещественного вектора $\bar{y}$ до вектора-решения y, имеющего целочисленные компоненты 0 и 1. В силу относительной малости возмущения правой части по сравнению с исходной правой частью более вероятна корректировка максимальных компонент до единицы, а не до нуля.

Как показали численные эксперименты, максимальные компоненты решения системы (3) с правой частью g^2 (для случайно сформированных КНФ) действительно с большой степенью вероятности соотносятся с единичными компонентами точного решения.

В таблице 1 приведен типичный результат соответствия между максимальными и минимальными значениями компонент решения $\bar{y}$ и нулями и единицами точного решения.

Следует заметить, что для случайно сформированных КНФ матрица системы (3) становится с большой степенью вероятности положительно определенной, т. к. некоторые вклады во внедиагональные элементы, рассматриваемые в лемме, взаимно сокращаются.

Это предположение оправданно и для матриц, ассоциированных с КНФ, кодирующими задачу нахождения простых делителей заданного числа. Для перехода от задачи факторизации к задаче

Таблица 1. Случайная КНФ, соответствие между экстремальными значениями вещественного решения и целочисленными решениями задачи ВЫПОЛНИМОСТЬ.

Номер бита	Решение $N = 70$, $M = 140$	Точное решение
14	1,36	1
39	1,17	1
63	1,03	1
5	0,966	1
61	0,961	1
50	0,960	1
65	0,952	0
10	0,918	1
...	...	...
4	−0,160	1
69	−0,161	0
67	−1,31	0

«3-ВЫПОЛНИМОСТЬ» основной операцией, которую необходимо закодировать в виде КНФ, является операция умножения двух чисел. Кодирование данной операции осуществляется на основе алгоритма умножения «столбиком», при этом сложение в одном разряде представляется в виде следующей системы, каждое уравнение которой кодируется в виде фрагмента 3-КНФ:

$$\begin{cases} s_1 = x \oplus c; \\ c_1 = x \wedge c; \\ s = s_1 \oplus y; \\ c_2 = s_1 \wedge y; \\ c' = c_1 \vee c_2 \quad \text{или } c' = c_1 \oplus c_2, \end{cases} \tag{4}$$

где $\oplus$ — операция исключающего «или», x, y, c — слагаемые (при этом c играет роль переноса из предыдущего разряда), s_1, c_1 — бит суммы и переноса от сложения $x + c$, s — результирующая сумма, c_2 — перенос от сложения $s_1 + y$, c' — результирующий бит переноса в старший разряд.

Лемма 2. *Система* (4) *верна тогда и только тогда, когда* s *и* c' *есть соответственно сумма и перенос от сложения трех битов* x, y *и* c*:*

$$2c' + s = c + x + y. \tag{5}$$

Доказательство леммы основывается на формальном соотнесении всех решений системы (4) (на множестве $\{0, 1\}$) с уравнением (5).

Достоинством представленной схемы кодирования является отсутствие дополнительных, не имеющих смысла с точки зрения исходной задачи, литералов в построенной КНФ. Кроме того, построенная КНФ не редуцируется методом резолюций, что в некотором смысле означает оптимальность данной схемы кодирования.

Таблица 2. Распознавание нулевых бит для задачи факторизации. N_1 — число неизвестных, N_2 — число предполагаемо нулевых неизвестных, N_3 — число точно определенных нулевых бит, P — отношение N_3 к N_2.

Количество битов числа	N_1	N_2	N_3	P
18	432	148	111	0,75
32	792	269	231	0,85
40	2280	768	659	0,85
42	2520	840	664	0,79
44	2772	932	840	0,90
46	3036	1024	904	0,82
48	3312	1114	1023	0,92
50	3600	1205	997	0,83
52	3900	1300	1218	0,94
54	4212	1364	1085	0,80
56	4536	1514	1264	0,84
58	4872	1634	1414	0,87
...	...	...	...	0,87
512	391680	130046	113082	0,87
1024	1569792	522238	451913	0,87

Возвращаясь к рассматриваемому тесту, заметим, что более значимые результаты получаются, если обратить внимание на то, что для некоторых КНФ нулевые компоненты в g_k^2 вероятней всего отвечают нулевым значениям целочисленного решения. В самом деле, уравнение с индексом k аккумулирует несколько исходных уравнений из (1) с индексами $k_1, \ldots, k_l$, в которых присутствует неизвестная x_k и $g_k = g_k^2 + \sum_{s=1}^{l} r_{k_s}$, $r_{k_s} = \pm 1$. Если в среднем добавочная сумма равна нулю, а k-е уравнение обладает диагональным преобладанием, то нулевые биты определяются с высокой степенью вероятности.

Данный тест оказался эффективным для КНФ, ассоциированных с задачей факторизации, диагональное преобладание для матриц присутствует, и добавочные r_{k_s} имеют в большем числе случаев среднее 0, и четверть всех неизвестных определяется с вероятностью большей, чем 0,8 (таблица 2). Учитывая, что есть альтернативный метод определения вероятности равенства бит нулю, основанный на минимизации функционала [3], при котором вероятность верного определения бит равна 0,7, то очевидно, что можно увеличить эту вероятность до величин больших или равных 0,9.

Рассмотрим общий случай, не предполагающий случайности в структуре матрицы. Воспользуемся тем, что матрица симметрична и спектр ее вещественный; тогда для любой правой части f можно

записать:

$$y = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i v_i,$$

где v_i — это собственные вектора, отвечающие собственным числам, определяемым из уравнения:

$$Bv_i = \lambda_i v_i,$$

здесь λ_i могут быть равны и нулю.

Правая часть системы (3) представляется в виде:

$$g = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \alpha_i v_i.$$

Определив спектр матрицы и соответствующие собственные вектора, можно аналогично предыдущему построить решение при правой части, равной g^2.

В итоге все вышесказанное можно рассматривать как теорему.

Теорема 3. *Компоненты кортежей* $(\alpha_1, \ldots, \alpha_N)$, *на которых достигается минимум функционала, равный нулю,*

$$J(\alpha_1, \ldots, \alpha_N) = \sum_{j=1}^{M} \prod_{q=1}^{3} C_j^q + I(\alpha_1, \ldots, \alpha_N);$$

$$C_j^q = \Big(q - \sum_{\xi \in \Xi_j} \Theta^{\xi q}\Big)^2;$$

$$\Xi_j = (i_1, i_2, i_3, \tau_1, \tau_2, \tau_3),\ \tau_t = 1 \vee 0,\ i_t \in \{1, .., N\};$$

$$\Theta^{\xi q} = \sum_{s=1}^{3} (-1)^{\tau_s} (y_{i_s} - \tau_s);$$

$$y_{i_s} = \sum_{w=1}^{N} \alpha_w v_{w i_s};$$

$$I(\alpha_1, ..., \alpha_N) = \sum_{z=1}^{N} y_z^2 (1 - y_z)^2,$$

являются коэффициентами разложения решения задачи ВЫПОЛНИМОСТЬ.

Здесь $y = \sum\limits_{w=1}^{N} \alpha_w v_w$, *где индекс* w *при* v *индексирует номер собственного вектора; множество индексов* Ξ_j *— это номера литералов, входящих в* j*-й дизъюнкт и отвечающие им индексы* τ, *определяющие, как входит литерал в дизъюнкт — с отрицанием или без него.*

Приведем схему доказательства: вектора v_i образуют ортонормированный базис в пространстве $\mathbb{R}^N$, поэтому вектор-решение разлагается по данному базису. Подстановка решения в исходные логические уравнения и последующий переход к вещественным числам задает в правой части одно из целых положительных чисел 1, 2, 3. Минимум функционала, равный нулю, достигается при подстановке решения, т. к. одна из скобок C_j^q равна нулю. Наоборот, если функционал равен нулю, то для каждого j и единственного q выполняется равенство $C_j^q = 0$.

Замечание 1. Результат может быть усилен, если известно, что решение исходной задачи ВЫПОЛНИМОСТЬ единственно. В этом случае матрица системы линейных уравнений по необходимости получается невырожденной и единственное решение этой системы будет целочисленно. Поэтому можно исключить требование равенства нулю функционала $I(\alpha_1, ..., \alpha_N)$.

Обратим внимание, что для практических приложений при представлении y в некоторых случаях можно попытаться ограничиться существенно меньшими суммами:

$$y^K = \sum_{i=1}^{K} \alpha_i v_i, \quad K \ll N.$$

Выводы

Таким образом, учитывая результат [3], удается неформально свести задачу ВЫПОЛНИМОСТЬ к задаче минимизации относительно независимых функционалов специального вида, одни из которых определяются неспоредственно из вида КНФ, другие ассоциированы с матрицей (3).

Представляется интересным дальнейшее исследование различных классов КНФ [4, 5] на предмет эффективности разработанных в работе алгоритмов.

Литература

[1] *Cook S. A.* The complexity of theorem proving procedures // Proceedings of the Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing. — 1971. — Pp. 151–158.

[2] *Gu J., Purdom P. W., Franco J., Wah B. W.* Algorithms for the satisfiability (sat) problem // Eds. Ding-Zhu Du Jun Gu and Panos Pardalos. — Satisfiability Problem. Theory and Applications. DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science. — AMS, 1997. — Pp. 19–152.

[3] *Дулькейт В. И., Файзуллин Р. Т., Хныкин И. Г.* Алгоритм минимизации функционалов ассоциированных с 3-SAT и его практические применения // Компьютерная оптика, Самара: ИСОИ РАН, СГАУ, 2008. — Т. 32, № 1. — С. 68-73.

[4] `www.lri.fr/~simon/` — 2010.

[5] `www.satlive.org` — Satlive — 2010.

Определение минимальных фрагментов, различающих слова над конечным алфавитом

Коротков Д. Ю., Сметанин А. Ю.
ООО Аруджи Ассет Менеджмент

Рассмотрена задача определения для заданного набора длинных последовательностей такого множества по возможности коротких фрагментов, которое обеспечивало бы возможность произвольного разбиения этого набора на классы. Для случая, когда имеется некоторая информация о структуре серий из одинаковых символов в последовательностях, определена длина фрагментов для различения пары слов. Предложены алгоритмы построения таких фрагментов.

Identification of minimal fragments separating words over a finite alphabet

Korotkov D. Yu., Smetanin A. Yu.
Aruji Asset Management

The problem of finding a set of short fragments shattering a given set of long words over a finite alphabet. For the case when partial information about the structure of the series of identical letters is known a priori, the length of the separating fragments for pairs of words is found. Algorithms for constructing such fragments are proposed.

Представление объектов в виде последовательностей является достаточно универсальным, а задача компактного представления конечных слов тесно связана с задачей отбора релевантного набора признаков, которая при таком представлении информации становится задачей комбинаторного анализа слов. По-видимому, первый результат о минимальном наборе признаков типа элементов двоичного слова для его выделения в заданной совокупности слов был получен в [1]. В прикладных задачах рассматриваются методы классификации с достаточной степенью достоверности на основе очень простых признаков — частот повторения определенных конфигураций символов [2]. Например, в качестве признаков для описания последовательностей протеинов используется число повторяющихся конфигураций [3]. Аналогичная задача возникает в интеллектуальном анализе данных и извлечении знаний [4].

Здесь рассмотрена следующая задача: даны слова длины n над конечным алфавитом; для каждой пары слов $x = x_1 \dots x_n,\ y = y_1 \dots y_n$ есть наименьший фрагмент $(a_1 \dots a_k)$, содержащийся в одном слове, $(a_1 \dots a_k) = (x_{i1} \dots x_{ik})$, и не содержащийся в другом; требуется определить среднюю по всем парам длину такого фрагмента.

Известно, что необходимым и достаточным условием однозначности восстановления слова x над двоичным алфавитом по множеству входящих в него фрагментов длины k является условие $k > n/2$ [5]. Для доказательства необходимости оценки используются слова, состоящие из $\lfloor n/2 \rfloor$ серий. При меньшем числе серий появляются фрагменты меньшей длины; это можно использовать для поиска коротких различающих фрагментов.

Произвольное слово можно представить в виде $x = \alpha^{k_1}\bar{\alpha}^{k_1} \dots \alpha^{k_{p-1}}\bar{\alpha}^{k_p}$ или $x = \alpha^{k_1}\bar{\alpha}^{k_1} \dots \bar{\alpha}^{k_{p-1}}\alpha^{k_p}$. Второй случай оказывается аналогичным первому и потому не рассматривается. Структура серий слова определяется значениями α и p.

Утверждение 1. *Для определения структуры серий слова достаточно двух фрагментов длины p: слово $x = \alpha^{k_1}\bar{\alpha}^{k_1} \dots, \alpha^{k_p}$ содержит фрагмент $\alpha\bar{\alpha} \dots \alpha$ и не содержит фрагмент $\bar{\alpha} \dots \alpha\bar{\alpha}$.*

Утверждение 2. *Если структура серий слов x и y различается, существует различающий их фрагмент длины p.*

Утверждение 3. *Если структуры слов совпадают, то существует различающий их фрагмент длины*

$$L = \begin{cases} p + \min(k_i, r_i) - 2, & p > 3, \\ p + \min(k_i, r_i) - 1, & p \in \{2, 3\}. \end{cases}$$

В этом случае фрагмент, разделяющий слова $x = 0^{k_1}1^{k_2} \dots 0^{k_{p-1}}1^{k_p}$ и $y = 0^{r_1}1^{r_2} \dots 0^{r_{p-1}}1^{r_p}$, имеет вид

$$\underset{(2)}{1} \dots \underset{(j-1)}{0} \underbrace{1 \dots 1}_{(j)} \underset{(j+1)}{0} \dots \underset{(p-1)}{0},$$

где нижний индекс указывает единственную серию, из которой может быть взят соответствующий символ, j определяется условием $k_j = \min\{k_i \mid k_i \neq r_i\}$, а длина j-й серии фрагмента равна $\min\{k_i, r_i\} + 1$. При наличии коротких отличающихся серий длина фрагмента может оказаться существенно меньше $n/2$.

Следующий результат дает метод реконструкции слов с малым числом серий, среди которых могут быть длинные.

Международная конференция «Интеллектуализация обработки информации» (ИОИ-8), Кипр, г. Пафос, 17–24 октября 2010 г.
International conference "Intelligent Information Processing" IIP-8, Cyprus, Paphos, October 17–24, 2010.

Утверждение 4. *Пусть слово* $x = 0^{k_1}1^{k_2}\ldots 0^{k_{p-1}}1^{k_p}$ *длины* n *с* m_0 *нулями состоит из* $p > 1$ *серий с неизвестными* k_i*. Тогда длины серий из нулей восстанавливаются по фрагментами длины*

$$L = \max\bigl\{p, \lfloor\tfrac{m_0+p}{2}\rfloor\bigr\}.$$

Доказательство заключается в описании алгоритма определения k_i.

Невозможность улучшения оценки $2L \geqslant m+p-1$ следует из простых примеров.

Для восстановления всего слова с m_0 нулями и m_1 единицами требуется длина фрагмента

$$L = \max\bigl\{p, \lfloor\tfrac{m_0+p}{2}\rfloor, \lfloor\tfrac{m_1+p}{2}\rfloor\bigr\}.$$

При $p \leqslant n/2-1$ максимум в выражении для L больше p, так как $\lfloor\frac{m_0+p}{2}\rfloor + \lfloor\frac{m_1+p}{2}\rfloor \geqslant (n/2-1)+p$, а, значит, хотя бы дно из слагаемых больше p. Единственный вариант, при котором максимум достигается в p: n — четное, $p = m_0 = n/2$. Во всех остальных случаях можно считать, что длина требуемых фрагментов

$$L = \max\bigl\{\lfloor\tfrac{m_0+p}{2}\rfloor, \lfloor\tfrac{m_1+p}{2}\rfloor\bigr\}.$$

В случае, если известно, что все серии слова (может быть, за исключением одной) короче некоторой фиксированной длины, оценку можно значительно улучшить.

Утверждение 5. *Пусть слово* x *длины* n *с* m_0 *нулями и* m_1 *единицами состоит из* $p > 1$ *серий, причем длина второй по величине серии равна* s*. Тогда слово* x *однозначно восстанавливается по фрагментам длины* $L = (p+s-1)$.

Можно показать, что число слов длины n, у которых длина максимальной серии равна c,

$$N(c) = \sum_i (-1)^{n-(c+1)i}\binom{t+(c+1)\,i-1}{(c+1)\,i}\binom{t}{n-i},$$

а средняя длина фрагментов, восстанавливающих слова с t сериями,

$$L(t) \leqslant \sum_{c=1}^{c_{\max}} \min\bigl\{t+c-1, \lfloor\tfrac{n}{2}+1\rfloor\bigr\}.$$

Поскольку эта длина зависит от числа и длины серий, алгоритмы особенно полезны при реконструкции в больших алфавитах. В этом случае средняя длина серий сильно уменьшается, а число серий растет значительно медленнее.

Литература

[1] *Журавлёв Ю. И.* Об оптимальных алгоритмах выбора // Докл. Акад. Наук СССР. — 1959. — Т. 121, № 3. — С. 411–414.

[2] *Apostolico A., Atallah M. J.* Compact Recognizers of Episode Sequences // Information and Computation. — 2002. — Vol. 174. — Pp. 180–192.

[3] *Wang J. T. L., Ma Q., Shasha D., Wu C. H.* New Techniques for Extracting Features from Protein Sequences // IBM Systems Journal. — 2001. — Vol. 40, No. 2. — Pp. 426–441.

[4] *He Q.* Knowledge Discovery Through Co-Word Analysis // Library Trends. — 1999. — Vol. 48, No. 1. — Pp. 133–159.

[5] *Леонтьев В. К.* Распознавание двоичных слов по их фрагментам // Докл. РАН. — 1993. — Т. 330, № 4. — С. 434–436.

Об одном процессе верификации алгоритмических схем

Лукъянова Е. А., Дереза А. В.
lukyanovaea@mail.ru
Симферополь, ТНУ им. В. И. Вернадского

Построен технологический процесс проверки свойств и анализа работы алгоритмической схемы на примере криптографического протокола Диффи-Хэллмана. Этот процесс применим к верификации свойств реактивных систем как статического характера, так и динамического.

About one process of verification of algorithmic schemes

Lukyanova E. A., Dereza A. V.
Tavrida National University, Simferopol, Ukraine

Technological process of check of properties and the analysis of work of the algorithmic scheme on an example of the cryptographic report of Diffie-Hellman is constructed. This process is applicable to verification of properties of the reactive systems as static character so run-time.

Для проверки правильности проектируемой системы альтернативой имитационному моделированию и тестированию являются методы формальной верификации, обеспечивающие, во-первых, глубокий анализ возможных вариантов поведения системы, во-вторых, позволяющие найти и исправить ошибки на любых этапах проверки, а в некоторых случаях гарантирующие отсутствие определенных ошибок.

Для этого реальная система подвергается формализации: выделяются для рассмотрения некоторые ее свойства, которые посредством формальной спецификации представляются в виде формулы формального логического языка, которая верифицируется, т. е. производится проверка того, удовлетворяет ли модель рассматриваемым специфицируемым свойствам реальной системы. В настоящей работе предлагается технологический процесс, применение которого иллюстрируется на примере исследования свойств криптографического протокола Диффи-Хэллмана, позволяющий анализировать алгоритмическую схему (программную систему). При этом алгоритмическая схема переводится в Сеть Петри (СП) [1], с помощью которой средствами линейной алгебры автоматически проверяются требуемые свойства исследуемой схемы (системы). Так, вычисление S- и T- инвариантов [2] рассматриваемой СП позволяет верифицировать, например, такие ее статические (структурные) свойства, как достижимость, ограниченность, безопасность, повторяемость, непротиворечивость и некоторые ее динамические свойства (отсутствие дедлока) [1].

Постановка задачи

Криптографический протокол Диффи-Хэллмана представляет собой алгоритмическую схему, позволяющую при незащищенном от прослушивания, но защищенном от модификаций канале связи, получать двум сторонам общий секретный ключ K, предназначенный для обмена конфиденциальной информацией. При этом один из пользователей создает свой собственный секретный ключ x и на его основе формирует промежуточный ключ $A = q^x \bmod (n)$, где n и q — большие простые числа, известные обоим пользователям, и после обмена промежуточными ключами общий секретный ключ вычисляется формулой $K = B^x \bmod (n)$, (B — промежуточный ключ второго пользователя).

Для анализируемой алгоритмической схемы в работе строится ее абстрактная модель в виде СП и формальный анализ свойств модели проводится посредством методов решения систем линейных однородных и неоднородных диофантовых уравнений (СЛОДУ, СЛНДУ) над множеством натуральных чисел при помощи алгоритма TSS [3, 4]. Это позволяет определить инварианты СП и провести их анализ. При этом предлагаемый технологический процесс полностью автоматический.

Моделирование алгоритмической схемы

Определение 1. *Будем называть сетью тройку (P, T, F) где P — непустое множество элементов сети, называемых местами, T — непустое множество элементов сети, называемых переходами, $F \subseteq P \times T \cup T \times P$ — отношение инцидентности между местами и переходами.*

Пусть $x \in P \cup T$ — произвольный элемент сети. Для элемента x определим множества его входных и выходных элементов: ${}^\bullet x = \{y | yFx\}$ и $x^\bullet = \{y | xFy\}$. Для тройки (P, T, F) требуется выполнение следующих условий:

1) множества мест и переходов не пересекаются: $P \cap T = \varnothing$;
2) любой элемент сети инцидентен хотя бы одному элементу другого типа:
$(F \neq \varnothing) \wedge (\forall x \in P \cup T,\ \exists y \in P \cup T \colon xFy \vee yFx)$;

3) сеть не содержит пары мест, которые инцидентны одному и тому же множеству переходов: $\forall p_1, p_2 \in P : ({}^\bullet p_1 = {}^\bullet p_2 \wedge p_1^\bullet = p_2^\bullet \Rightarrow p_1 = p_2)$.

Определение 2. *Разметкой сети* $S = (P, T, F)$ *называется функция* $M\colon P \to N$. *Если* $M(p) = k \in N$, *то говорят, что в месте* $p \in P$ *имеется* k *фишек или говорят, что функция помещает* k *фишек в место* p *сети* S.

Определение 3. *Сеть Петри — это пара* (S, M_0), *где* S *— некоторая сеть, а* M_0 *— некоторая начальная разметка сети* S.

Модель схемы представляет собой тройку (S, W, M_0), где S — сеть, $W\colon F \to N$ — функция кратности дуг (F — отношение инцидентности или зависимость между местами P и переходами T), M_0 — начальная разметка сети. Функция $M\colon P \to N$ — разметка сети S, описывающая количество фишек $M(p)$, которые помещаются этой разметкой в каждое место $p \in P$. Пусть $I\colon (P \times T) \cup (T \times P) \to \to N$ — функция инцидентности:

$$I(x,y) = \begin{cases} n, & \text{если } (x,y) \in F \wedge W(x,y) = n; \\ 0, & \text{если } (x,y) \notin F. \end{cases}$$

Если $P = \{p_1, \ldots, p_n\}$, то разметку M сети можно задать как вектор чисел $M = (m_1, \ldots, m_n)$ такой, что $m_i = M(p_i)$ для любого $i = 1, \ldots, n$. Каждому переходу t сопоставим два вектора ${}^\bullet F(t)$ и $F(t)^\bullet$ длины n, где $n = |P|$:

$${}^\bullet F(t) = (b_1, \ldots, b_n), \quad b_i = I(p_i, t);$$
$$F(t)^\bullet = (c_1, \ldots, c_n), \quad c_i = I(t, p_i).$$

Переход $t \in T$ допустим на разметке M сети Петри (S, M_0) тогда и только тогда, когда $\forall p \in {}^\bullet t\colon M(p) \geqslant I(p,t)$. Срабатывание перехода t при разметке сети M порождает разметку сети M' (обозначение $M \longrightarrow^t M'$) по правилу

$$M'(p) = M(p) - I(p,t) + I(t,p).$$

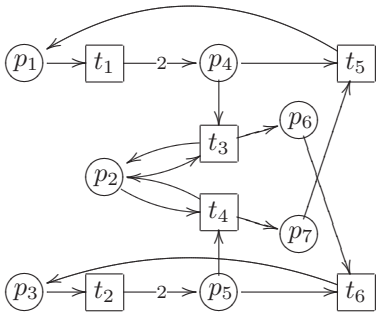
Разметка M достижима из начальной разметки M_0, если существует последовательность разметок $M_0, M_1, \ldots, M$ и последовательность переходов $\sigma = t_1 t_2 \ldots t_r$ такие, что

$$M_0 \longrightarrow^{t_1} M_1 \longrightarrow^{t_2} \ldots \longrightarrow^{t_r} M.$$

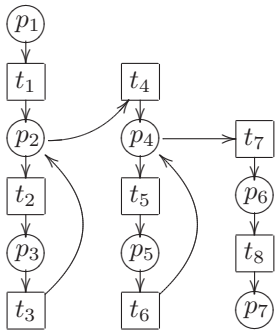
Представим сначала работу схемы Диффи-Хэллмана в виде некоторой последовательной программы, результатом работы которой будет стабильное получение каждым из пользователей общего секретного ключа, для дальнейшего обмена и шифровки информациии:

begin
input(x); input(K_1); input(A); input(n); t_1
input(y); input(K_2); input(B); input(n); t_2
input(q); $A := q^x \bmod (n)$; t_3
input(q); $B := q^y \bmod (n)$; t_4
$K_1 := B^x \bmod (n)$; t_5
$K_2 := A^y \bmod (n)$; t_6
end

Сеть Петри, моделирующая эту программу:



Переходы t_3, t_4 и t_5, t_6 соответствуют процессу вычисления $q^x \bmod (n)$. Если рассмотреть этот процесс отдельно, как последовательную программу, то соответствующая СП будет иметь вид:



Таким образом, получено представление исходной схемы (системы) в виде формальной модели.

Анализ модели

Для сети Петри (S, W, M_0) с n переходами и m местами строится матрица инцидентности A размера $n \times m$ с целыми коэффициентами $a_{ij} = I(t_j, p_i) - I(p_i, t_j)$, где I — отношение инцидентности данной СП, а коэффициенты a_{ij} представляют число фишек, которые перемещаются, изменяются и добавляются в место p_i при срабатывании перехода t_j в системе (S, W, M_0). По матрице инцидентности A строится система уравнений состояний СП (S, W, M_0)

$$Ax = d, \tag{1}$$

где $d = M_k - M_0$ (M_0, M_k — соответственно начальная и конечная разметки СП), $x = \sum\limits_{j=1}^{k} u_j$, где u_k — вектор контроля, состоящий из $n-1$ нулевых компонент и одной j-й компоненты, равной 1, сигнализирующей о срабатывании на k-м шаге перехода t_j.

В случае достижимости разметки M_k из разметки M_0 система (1) всегда имеет решение [5].

Для СП (S, W, M_0) строится множество T- и S-инвариантов.

Решение x СЛОДУ $Ax = 0$, когда в (1) $M_0 = M_k$, называется T-инвариантом СП.

Решение y СЛОДУ $A^{\intercal}y = 0$ называется S-инвариантом СП.

С помощью T- и S-инвариантов исследуются структурные свойства СП.

Определение 4. *Порождающее множество S-инвариантов (T-инвариантов) называется минимальным порождающим множеством S-инвариантов (T-инвариантов), если не существует ни одного не пустого его подмножества, которые тоже есть порождающим множеством.*

Из теории диофантовых уравнений [5], следует, что усеченное множество решений СЛОДУ, соответствующее данной СП, составляет минимальное порождающее множество S-(T-)инвариантов и для построения этого множества можно использовать TSS-алгоритм.

Теорема 1. *Если все места СП покрываются позитивными S-инвариантами, то СП ограничена.*

Матрица инцидентности, соответствующая первой СП имеет вид:

$$\begin{array}{cccccc} -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{array}$$

Поскольку разметка на k-м шаге

$$M_k = (1, 1, 1, 0, 0, 0, 0)$$

равна начальной разметке $M_0 = (1, 1, 1, 0, 0, 0, 0)$, строим СЛОДУ. Ее положительные целочисленные решения являются T-инвариантами СП. СЛОДУ имеет вид:

$$\begin{cases} -x_1 + x_5 = 0; \\ -x_2 + x_6 = 0; \\ 2x_1 - x_3 - x_5 = 0; \\ 2x_2 - x_4 - x_6 = 0; \\ x_3 - x_6 = 0; \\ x_4 - x_5 = 0. \end{cases}$$

Вопрос совместности полученной системы решаем с помощью построения усеченного множества решений (TSS-алгоритм) — в результате получим вектор $e = (1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)$ — T-инвариант.

Для поиска S-инвариантов соответствующая СЛОДУ имеет вид:

$$\begin{cases} -x_1 + 2x_4 = 0; \\ -x_3 + 2x_5 = 0; \\ -x_4 + x_6 = 0; \\ -x_5 + x_7 = 0; \\ x_1 - x_4 - x_7 = 0; \\ x_3 - x_5 - x_6 = 0. \end{cases}$$

Совместность этой системы также устанавливается с помощью TSS-алгоритма, в результате находим векторы $e_1 = (0, 1, 0, 0, 0, 0, 0)$, $e_2 = (2, 0, 2, 1, 1, 1, 1)$ — S-инварианты.

Матрица инциндентности, соответствующая второй сети Петри, выглядит следующим образом:

$$\begin{array}{cccccccc} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}$$

По данной матрице строим систему линейных диофантовых уравнений. Начальная разметка для этой СП и разметка на k-м шаге следующие: $M_0 = (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$, $M_k = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1)$.

Тогда получаем систему линейных неоднородных диофантовых уравнений (СЛНДУ):

$$S = \begin{cases} -x_1 = 1; \\ x_1 - x_2 + x_3 - x_4 = 0; \\ x_2 - x_3 = 0; \\ x_4 - x_5 + x_6 - x_7 = 0; \\ x_5 - x_6 = 0; \\ x_7 - x_8 = 0; \\ x_8 = 1. \end{cases}$$

Согласно критерию совместности СЛНДУ [3], по полученной СЛНДУ S строим соответствующую ей СЛНДУ S':

$$S' = \begin{cases} x_8 - x_1 = 0 \\ x_1 - x_2 + x_3 - x_4 = 0 \\ x_2 - x_3 = 0 \\ x_4 - x_5 + x_6 - x_7 = 0 \\ x_5 - x_6 = 0 \\ x_7 - x_8 = 0 \\ x_8 = 1. \end{cases}$$

Теорема 2. *Система S совместна тода и только тогда, когда совместна система S' .*

Совместность системы S' устанавливает теорема:

Теорема 3. *Система S' совместна тогда и только тогда, когда уравнение*

$$d_1u_1 + d_2u_2 + \ldots + d_ku_k - tb_p = 0$$

имеет хотя бы одно решение $(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k, \gamma)$ *во множестве натуральных чисел* $\mathbb{N}$ *такое, что координаты вектора* $v = \alpha_1 e'_1 + \alpha_2 e'_2 + \ldots + \alpha_k e'_k$, *кратны числу* γ, *где* e'_i — TSS *решения системы* S', $t, \gamma \neq 0,\ \alpha_i, \gamma, t \in \mathbb{N},\ i = 1, \ldots, k$.

Тогда для первых шести уравнений системы S' множество TSS состоит из 6 векторов:

$$(1,0,0,1,0,0,1,1)$$
$$(1,1,1,1,0,0,1,1)$$
$$(1,1,1,1,1,1,1,1)$$
$$(1,0,0,1,1,1,1,1)$$
$$(0,1,1,0,0,0,0,0)$$
$$(0,0,0,0,1,1,0,0).$$

Седьмому уравнению удовлетворяют только 4 первых вектора. Значения на этих векторах для последнего уравнения системы S' таковы: $1, 1, 1, 1$. Согласно теореме 3 получаем уравнение

$$1u_1 + 1u_2 + 1u_3 + 1u_4 - 1t = 0.$$

Возьмем один из его корней, например, $(1, 1, 1, 1, 4)$. Тогда, вектор-решение системы S' имеет вид $(4, 2, 2, 4, 2, 2, 4, 4)$, и система S' совместна. А из теоремы 2 следует, что совместной будет соответствующая системе S' система S.

Выводы

Проведенный анализ построенных СП позволяет установить свойства абстрактной модели. По полученным S- и T-инвариантам построенной СП устанавливаются ее структурные свойства: ограниченность, безопастность, повторяемость, непротиворечивость [1]. Так, для СП, моделирующей схему Диффи-Хэллмана, из множества ее S-инвариантов $e_1 = (0, 1, 0, 0, 0, 0, 0)$, $e_2 = (2, 0, 2, 1, 1, 1, 1)$, согласно теореме 1 следует ее ограниченность, все места СП покрываются ненулевыми координатами, и можно получить верхнюю оценку для фишек, помещающихся в любое место, например, для p_2:

$$M(p_2) \leqslant \frac{M_0 e_1^{\intercal}}{e_1(p)} = 1,$$

а максимальная оценка числа фишек, например, для p_4:

$$M(p_4) \leqslant \frac{M_0 e_2^{\intercal}}{e_2(p)} = 4.$$

Это означает, что полученная СП, являясь ограниченной, не является безопасной (так как существуют позиции сети, в которых число фишек превышает значение 1). В исследуемом случае возможна принудительная безопасность — построить безопасную сеть, эквивалентную данной. Такая сеть в работе не приводиться в связи с ее громоздкостью.

Наличие T-инвариантов (все переходы покрываются ненулевыми координатами из множества T-инвариантов) указывает на обладание СП свойством повторяемости, что интерпретируется в схеме Диффи-Хэллмана обменом новыми ключами бесконечное число раз. А так как в сети существует последовательность срабатываний переходов, которая запускается по крайней мере один раз, то рассматриваемая СП обладает свойством непротиворечивости, что для исходной схемы означает возможность всегда приходить в исходное состояние. При моделировании схемы Диффи-Хэллмана оказалось необходимым отдельное представление участка, моделирующего $q^x \bmod (n)$, но на работе всей модели это не отразилось, так как соответствующая этой сети СЛДНУ совместна, а следовательно в сети всегда имеется возможность перехода из одного заданного состояния в другое.

Итак, проведя анализ работы первой СП с учетом работы СП, моделирующей вычисление $q^x \bmod (n)$, имеем, что все перечисленные основные свойства построенной модели (ограниченность, повторяемость, непротиворечивость) сохраняются.

Литература

[1] *Котов В. Е.* Сети Петри. — М.: Наука, 1984.

[2] *Murata T.* Petri Nets: Properties, Analysis and Applications // Proceedings of the IEEE. — 1989. — Vol. 77.— № 4. — p. 541–580.

[3] *Крывый С. Л.* Критерий совместности систем линейных диофантовых уравнений над множеством натуральных чисел // Доклады НАНУ. — 1999. — № 5. — С. 107–112.

[4] *Чугаенко А. В.* О реализации TSS алгоритма // Управляющие системы и машины. — 2007. — № 3. — С. 26–32.

[5] *Крывый С. Л.* Алгоритмы решения систем линейных диофантовых уравнений в целочисленных областях // Кибернетика и системный анализ. — 2006. — № 2. — С. 3–17.

A new RST-invariant robust image watermarking method based on blockwise host image processing*

Glumov N. I., Mitekin V. A.
nglu@smr.ru, mitekin@smr.ru
Institution of Russian Academy of Sciences, Image Processing Systems Institute of RAS, Samara, Russia

In this paper a new algorithm for digital watermarking large-scale digital images is proposed. The proposed algorithm provides watermark robustness to a wide range of host image distortions and this algorithm has a number of advantages as compared to known robust watermarking algorithms.

Introduction

Robust watermark embedding [1] into digital images has two major applications — a copyright protection and a prevention of multimedia data unauthorized copying. Both cases determine the following essential requirements for the watermarking scheme:

1. Robustness of the embedded watermark to a wide range of host image distortion [1, 2, 3], such as cropping, linear and nonlinear filtering, lossy compression, etc. (in this case robustness is treated as a possibility to detect and extract watermark from the distorted host image)
2. Low computational complexity of the watermarking procedure, as well as a possibility to perform watermarking procedure using a streaming mode [3] (in the case of digital images watermarking — blockwise mode usage).

The existing robust watermarking algorithms have a significant disadvantage — most of these algorithms perform watermark embedding in a transform domain[1, 2], i.e. forward and inverse DFTs (discrete Fourier transform) of the whole host image are the necessary stages of watermark embedding. Providing the robustness of the embedded watermark to rotation, scaling and cropping of the host image (the so-called RST-invariant watermarking, [4]), this approach considerably increases the computational complexity of the embedding procedure and makes blockwise watermark embedding impossible.

The algorithm of robust watermarking embedding is proposed in this paper, which makes watermark embedding by host image blockwise processing possible and does not require spectral transforms of the host image during embedding. Besides, the presented algorithm as well as the algorithms based on host image spectral transforms provides the watermark robustness to rotation, scaling and cropping of host image, as well as to the number of other widely-used image modification techniques (lossy compression, additive noise masking, linear filtering and etc.)

The work was financially supported by Federal Target Programme "The scientific and pedagogical staff of innovative Russia" (the contract 02.740.11.0001. and by Russian Foundation for Basic Research (projects 09-01-00511, and 07-01-96612).

The proposed algorithm can also be treated as resistant to the most popular attacks against robust watermarking schemes, such as watermark copy attack and watermark template attack.

An overview of the existing robust watermarking algorithms

The existing algorithms of robust digital watermarking can be conventionally divided into two classes. *The algorithms of watermark embedding into the transform domain of a host image.* The following group of algorithms [4, 5, 6, 7] assume a watermark embedding into distortion-invariant transform domain of the host image (Fourier-Mellin transform is used for the RST-invariant watermarking by the algorithms of this class). The main disadvantages of these algorithms belonging to this class are the computational complexity of embedding procedure and image distortions introduced because of host image transforms during watermark embedding. Besides, most of the algorithms of the following class are used by so-called "non-blind" detector [1] and do not allow to embed unknown to the receiver bit sequence as a watermark.

The algorithms using the so-called "synchronization marks" to detect and correct the distortions of host image. In this case *"synchronization marks"* resistant to distortions are embedded into the host image before the process of watermark embedding, which makes it possible to detect and correct the distortions introduced into host image after embedding. The set of peaks in the image magnitude spectrum [8, 9] are typically used as such marks. The main disadvantage of the algorithms of this group is their vulnerability to the so called "watermark template attack". In fact, the attacker can reveal and delete the "synchronization marks" from the host image without knowing the embedding key (the "synchronization marks" are usually equal for all host images with the embedded watermark). This will make impossible the future watermark extraction. For both classes of embedding algorithms, forward and inverse DFTs (discrete Fourier transforms) of the whole host image are the necessary stages of watermark embedding make blockwise embedding impossible.

In next section the robust image watermarking algorithm developed by authors is proposed. It allows

to overcome the mentioned drawbacks of existing watermarking algorithms and also makes possible watermark embedding using blockwise host image processing.

Robust watermark embedding method based on blockwise host image processing

The proposed watermarking algorithm can be described as the procedure of summing the synthesized noise-like two-dimensional signal based on the watermark $W_{\text{bit}}(m)$ with a host image. User-defined watermark bit sequence $W_{\text{bit}}(m)$where $m \in [0, M-1]$ can be used for encoding a copyright holder code, image receiving date, etc.

The synthesis of noise-like watermark image $W(n_1, n_2)$ based on the watermark $W_{\text{bit}}(m)$ is performed as follows: pair of one-dimensional binary sequences $S_1(k)$ and $S_0(k)$, corresponding to 1 and 0 of the watermark $W_{\text{bit}}(m)$are chosen as a stenographic key. The length of these sequences is fixed and equal to K=180. The following conditions should be fulfilled for sequences $S_1(k)$ and $S_0(k)$:

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^{K-1} S_0(k) \ll K; \\ \sum_{k=0}^{K-1} S_1(k) \ll K; \\ \sum_{k=0}^{K-1} S_1(k) \approx \sum_{n=0}^{N-1} S_0(k); \\ \max\limits_{\Delta k} \sum\limits_{k=0}^{K-1} S_0(k) \cdot S_1\left(\left\{\frac{(k+\Delta k)}{K}\right\}\right) \ll \sum\limits_{k=0}^{K-1} S_1(k); \end{cases}$$

where $\{\cdot\}$ is a remainder after division.

After that, the image $W(n_1, n_2)$of $N \times N$ pixels size encoding the bit sequence $W_{\text{bit}}(m)$ is synthesized in the following way.

1. Centered magnitude spectrum [10] of the watermark image $C_{\text{pol}}(r, \varphi)$, where $r \in [0, N/2]$, $\varphi \in [0, 179]$, is formed using polar coordinates:

$$\left|C_{\text{pol}}(r, \varphi)\right| = \begin{cases} 1, & \text{if } r = R_m \text{ and } S_0(\varphi) = 1; \\ 1, & \text{if } r = R_m \text{ and } S_1(\varphi) = 1; \\ 0, & \text{otherwise;} \end{cases}$$

   where R_m values m selected randomly from mid-frequency range of $C_{\text{pol}}(r, \varphi)$ according to the following rule: $R_m < R_{m+1}$ for all $m \in [0, M-2]$. The phase values of the $C_{\text{pol}}(r, \varphi)$ spectrum are filled by pseudo-random numbers.
2. The transformation of spectrum $C_{\text{car}}(u, v) = \text{car}(C_{\text{pol}}(r, \varphi))$is performed where car is polar-to-cartesian transform using bilinear interpolation [11].
3. Digital watermark image $W(n_1, n_2)$ of $N \times N$ size is calculated using centered inverse DFT [10] of $C_{\text{car}}(u, v)$.

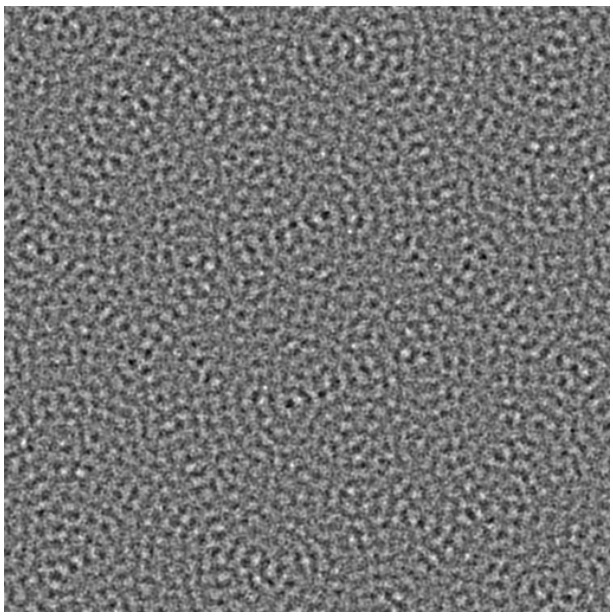


Fig. 1. The example of noise-like watermark image.

The example of watermark image synthesized for *M=12* is shown in Figure 1 (synthesized image size is 512×512 pixels).

Watermark embedding is performed by summing the host image $I(m_1, m_2)$, where $m_1 \in [0, M_1 - 1]$, $m_2 \in [0, M_2 - 1]$, with watermark image $W(n_1, n_2)$:

$$I'(m_1, m_2) = I(m_1, m_2) + Q \cdot \sqrt{\frac{I_{\text{disp}}(m_1, m_2)}{W_{\text{disp}}}} \times$$
$$\times \big(W(\{m_1/N\}, \{m_2/N\}) - W_{\text{mean}}\big),$$

where $I_{\text{disp}}(m_1, m_2)$ is the local variance mask of the host image, W_{mean} and W_{disp} —the mean and the variance of the $W(n_1, n_2)$ image luminance correspondingly, $I'(m_1, m_2)$ —host image with the embedded watermark, Q —the watermark amplification coefficient.

It is necessary to mention that the suggested algorithm makes it possible to embed digital watermarks by blockwise host mage processing, with the size of the block equals to $N \times N$ pixels. In the meanwhile there is no matter how large are the sizes of the host images M_1 and M_2.

The examples of host images with the embedded watermark are given in Figure 2.

The watermark extraction is performed as follows. The host image $I'(m_1, m_2)$ is divided into L non-overlapping fragments $I'_l(n_1, n_2)$ where $n_1, n_2 \in [0, N-1]$. Then the centered magnitude spectrum values $\text{C}_l(n_1, n_2)$ are calculated for each fragment using the centered DFT transform [10] and the average centered magnitude spectrum $C'(n_1, n_2) = \frac{1}{L} \sum_{l=0}^{L-1} C_l(n_1, n_2)$ is calculated for whole host image.

After that the value $C'_{\text{pol}}(r, \varphi)$ is calculated using cartesian-to-polar transform (according to [11]) of

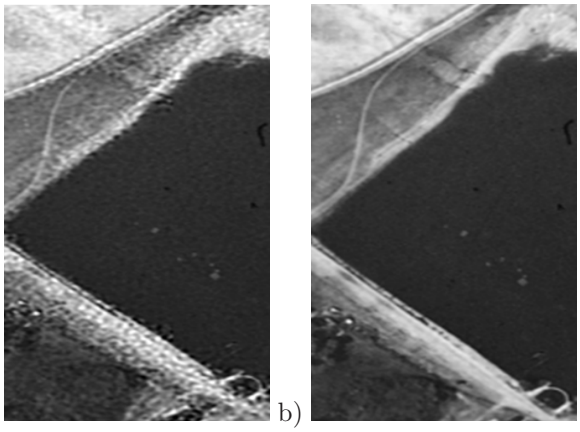


Fig. 2. The host image fragments with the embedded watermark: a) $Q = 0.7$ (MSE = 10.434); b) $Q = 0.07$ (MSE = = 0.2817).

the average centered magnitude spectrum $C'(n_1, n_2)$, where $r \in [0, N/2-1]$, $\varphi \in [0, K-1]$. Then the following cross-correlation values are calculated for watermark detection:

$$R_0(r, \Delta\varphi) = \sum_{\varphi=0}^{K-1} C'_{\text{pol}}(r, \varphi) \cdot S_0\left(\left\{\frac{(\varphi + \Delta\varphi)}{K}\right\}\right);$$

$$R_1(r, \Delta\varphi) = \sum_{\varphi=0}^{K-1} C'_{\text{pol}}(r, \varphi) \cdot S_1\left(\left\{\frac{(\varphi + \Delta\varphi)}{K}\right\}\right);$$

$$R_{\text{detect}}(r) = \max_{\Delta\varphi} \left| R_0(r, \Delta\varphi) - R_1(r, \Delta\varphi) \right|.$$

The detection and extraction of the watermark $W_{\text{bit}}(m)$ is performed independently for every $C_{\text{pol}}(r, \varphi)$ row. Watermark bit is detected in line r_0 in case if $R_{\text{detect}}(r_0) > T$, where T — a threshold value determined experimentally using the host images training set. In case if $R_{\text{detect}}(r_0) > T$ condition is true for some r_0 , the watermark bit value is calculated as

$$W_{\text{bit}}(m_0) = \begin{cases} 0, & \max\limits_{\Delta\varphi} R_0(r_0, \Delta\varphi) > \max\limits_{\Delta\varphi} R_1(r_0, \Delta\varphi); \\ 1, & \max\limits_{\Delta\varphi} R_0(r_0, \Delta\varphi) < \max\limits_{\Delta\varphi} R_1(r_0, \Delta\varphi); \end{cases}$$

Watermark bits $W_{\text{bit}}(m)$, where $m \in [0, M-1]$, are extracted by examining all $R_{\text{detect}}(r)$ values in ascending order of index r. Proposed heuristic watermark detection algorithm is based on a correlation-based watermark detection algorithm [1, 2, 3, 8] which is widely used for robust non-blind watermark detection

The experimental research of proposed watermark robustness

In order to examine the robustness of the proposed watermark embedding and extraction algorithms to a widely-used types of host image distortions, the following experiment was performed. Watermark image $W(n_1, n_2)$ was synthesized with $N = 1024$, $M = 12$ parameters values. Three independent watermark embedding experiments with values of $Q = = \{0,07; 0,15; 0,25\}$ were performed for the set of 100 host images of 4096×4096 pixel size each. In all cases embedding was performed using a green channel of color image represented in RGB colorspace. As a result of embedding 300 containers with embedded watermarks were obtained.

Table 1. The efficiency of watermark extraction from the distorted host image.

	The efficiency of watermark extraction, P_{ext}		
Host image distortions	$Q = 0.07$	$Q = 0.15$	$Q = 0.25$
Cropping (up to 25%)	0.99	1.0	1.0
Additive noise $\sigma = 15$	0.99	0.99	1.0
Median filtering (3×3 pixels window)	0.92	0.97	0.99
Rotation by 15° and cropping up to 25%	0.98	0.99	1.0
JPEG-compression, $q = 80$	0.94	0.97	1.0

After that all images of test set are exposed by the certain type of distortion (see Table 1, the first column) and then watermark was extracted from distorted host images.

For every type of distortion the efficiency of watermark extraction $P_{\text{ext}} = \frac{N_{\text{ext}}}{100}$ was calculated for 300 host images. A number of distorted images for which all watermark bits were detected and correctly extracted (and no "false" bits were revealed from the host image) was used as N_{ext}value. The results of experimental research of the watermark extraction efficiency are shown in Table 1.

The achieved results show that the developed watermarking algorithm is robust enough to the main types of host image distortions to be applied in practice.

Conclusion

The algorithm of robust watermarking embedding is proposed in this paper, which makes possible the watermark embedding by host image blockwise processing and does not require a spectral transforms of a host image during embedding. The developed algorithm allows to embed and extract the user-defined watermark bit sequence into a host image, i.e. implements the so-called "blind" watermark detector.

Besides, as show the results of experimental research, the represented algorithm provides the robustness of an embedded watermark to the rotation, scaling and cropping of the host image, as well as to a number of other widely-used transformations (lossy

compression, additive noise masking, linear filtering, etc.)

In contrast to a number of existing algorithms, the developed algorithm does not use the fixed "synchronization marks" to provide watermark robustness and, consequently, can be treated as resistant to the attacks against watermarking algorithm using known "synchronization marks" patterns (so called watermark copy attack, watermark template attack).

References

[1] *Cox I. J., Miller M., Bloom J.* Digital watermarking and steganography — Morgan Kaufmann, 2008.

[2] *Barni M.* Watermarking Systems Engineering — CRC Press, 2004.

[3] *Furht B., Kirovski D.* Multimedia Security Handbook — CRC Press, 2005.

[4] *O'Ruanaidh J. K., Pun T.* Rotation, scale, and translation invariant digital image watermarking // Santa Barbara,Proceedings of ICIP, 1997 — pp. 536–539.

[5] *O'Ruanaidh J. K., Pun T.* Rotation, scale, and translation invariant spread spectrum digital image watermarking // Signal Processing. — 1998 — No. 66. — pp. 303–317.

[6] *Lin C. Y., Wu M., Bloom J. A., Cox I. J., Miller M. L., Liu Y. M.,* Rotation, scale, and translation resilient watermarking for images // IEEE Trans on Image Processing — 2001 — No. 10(5) — Pp. 767–782.

[7] *Kim B. S., Choi J. G., Park C. H., Won J. U., Kwak D. M., Oh S. K.,Koh C. R., Park K. H.,* Robust digital image watermarking method against geometrical attacks // Real-Time Imaging — 2001 — No. 10(5) — Pp. 767–782.

[8] *Pereira S., O'Ruanaidh J. K., Deguillaume F., Csurka G., Pun T.,* Template based recovery of Fourier-based watermarks using log-polar and log-log map // Proceedings of ICMCS, Florence, Italy, 1999 — Pp. 870–874.

[9] *Pereira S., Pun T.,* Robust template matching for affine resistant image watermarks // IEEE Trans on Image Processing, 2000 — No. 9(6) — Pp. 1123–1129.

[10] *Briggs W., Henson V.* The DFT: an owner's manual for the discrete Fourier transform — Cambridge University Press, 1995.

[11] *Reddy B., Chatterji B.,* A FFT-Based Technique for Translation, Rotation, and Scale-Invariant Image Registration // IEEE Trans on Image Processing, 1996 — No. 8(5) — Pp. 1266–1271.

A new algorithm for image authentication and information hiding using pseudo-quantization*

Glumov N. I., Mitekin V. A.
nglu@smr.ru, mitekin@smr.ru
Institution of Russian Academy of Sciences, Image Processing Systems Institute of RAS, Samara, Russia

A new semi-fragile (i. e. robust to a certain set of host image modification methods) watermarking algorithm for combined data hiding and host image tampering detection is proposed, which allows to overcome major limitations and drawbacks of an existing watermarking schemes.

Introduction

Fragile watermark embedding into digital images has two major appliances — hidden data embedding for information transfer [1] and image authentication (image tampering detection) [1, 2]. Nowadays the majority of existing fragile watermarking schemes can't be used for both hidden data embedding and image authentication. In the current paper a new semi-fragile watermarking algorithm is proposed, which allows to embed a hidden user-defined watermark and at the same time provides a host image authentication for block-based tampering detection. In addition, as it will be shown below, a proposed algorithm has a number of advantages compared with existing watermarking schemes indented for hidden information transfer or image authentication.

A review of existing fragile watermarking algorithms

Existing fragile watermarking schemes can be divided into two major groups depending on their appliance. Watermarking schemes belonging to *class 1* are intended for a host image authentication and tampering prevention by embedding a predefined watermark into an image. A user-defined reference watermark [2, 3] or an image-dependent noise-like [2, 4] information sequence can be used in this case. The embedded watermark should be non-resistant to a common image modification techniques (such as blur, linear filtering, additive noise, etc.)

The recipient extracts watermark from the host image and compares with an known reference watermark to detect any host image modification and to confirm image authenticity. This algorithm is called "non-blind watermarking" and assumes that a reference watermark is known to the recipient. The fragile watermarking algorithms are proposed in [2, 4] should be referred as algorithms of the first class.

Watermarking schemes belonging to *class 2* are intended for embedding a user-defined watermark which is undetectable without knowing of the secret embedding key. In this case, a watermark is intended for hidden information transfer using host image as an open information channel. The recipient can detect an unknown watermark and extract it using known embedding key. Such a scheme, also called "blind watermarking" assumes that a watermark is not known by the recipient and can be extracted using only the host image and embedding key.

Fragile watermarking schemes are proposed in [2, 5] should be referred as algorithms of the second class.

In this paper a new semi-fragile watermarking algorithm developed by authors is proposed. This algorithm solves 2 tasks: data hiding and host image tampering detection, and also is robust to the set of "non-tampering" host image modification techniques, such as image cropping, rotation by 90° angle, and image contrast enhancement.

Watermark embedding and extraction method

The proposed watermark embedding method is similar to the quantization index modulation method (QIM, [3, 5]) and can be described as a pseudo-quantization procedure.

Let $I(n,m)$ is an input host image, $W(n,m)$ — a watermark binary image, $n \in [1,N]$, $m \in [1,M]$.

For integer pixel intensity values $I(n,m)$, $I'(n,m)$

$$I'(n,m) = \begin{cases} \left[\frac{I(n,m)}{q}\right] \cdot q + \left\{\frac{2I(n,m)}{q}\right\}, \\ \qquad\qquad \text{if } W(m,n) = 0; \\ \left[\frac{I(n,m)}{q}\right] \cdot q + \left\{\frac{2I(n,m)}{q}\right\} + \frac{q}{2}, \\ \qquad\qquad \text{if } W(m,n) = 1; \end{cases}$$

where $I'(n,m)$ — a host image with an embedded watermark, $[\cdot]$ — a rounding down operator, $\{\cdot\}$ — the remainder of division, q — the quantization step defining a host image distortion caused by watermark embedding.

As the assumption $\left\{\frac{2I(n,m)}{q}\right\} < \frac{q}{2}$ is true and $\left[\frac{I(n,m)}{q}\right] \cdot q$ is divisible by q for any positive integer $I(n,m)$ and positive even q , the watermark extraction

The work was financially supported by Federal Target Programme "The scientific and pedagogical staff of innovative Russia" (the contract 02.740.11.0001. and by Russian Foundation for Basic Research (projects 09-01-00511, and 07-01-96612).

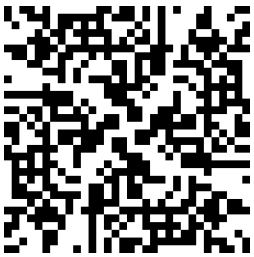


Fig. 1. Sample pseudo-random "key image", size $L = 32$.

procedure can be defined by the following expression

$$W'(n,m) = \begin{cases} 0, \text{ if } \left\{ \dfrac{I'(n,m)}{q} \right\} < \dfrac{q}{2}; \\ 1, \text{ if } \left\{ \dfrac{I'(n,m)}{q} \right\} \geqslant \dfrac{q}{2}; \end{cases}$$

where $W'(n,m)$ is the extracted watermark.

The block-wise image watermarking and tamper detection algorithm

The watermarking algorithm which allows a one watermark pixel embedding into a host image block of pixels (pixel-to-block mapping) is given below. This algorithm combines hidden information embedding ("non-blind watermarking" scheme) and host image authentication and tampering detection (which usually means usage of "blind watermarking" scheme).

Let L is the size of a given host image block used for embedding one watermark pixel (bit), $K(i,j)$, where $i \in [1,L],\ j \in [1,L]$ — is a pseudo-random "key image" secretly shared between sender and receiver of watermark (Figure 1), and $W_b(u,v)$is a watermark image, where $u \in \left[1,[N\backslash L]\right],\ v \in \left[1,[M\backslash L]\right]$.

The block-wise watermark embedding procedure is defined by the following expression:

$$I'(n,m) = \begin{cases} \left[\dfrac{I(n,m)}{q} \right] + \left\{ \dfrac{2I(n,m)}{q} \right\}, \\ \qquad\qquad \text{if } \widehat{W}(m,n) = 0; \\ \left[\dfrac{I(n,m)}{q} \right] + \left\{ \dfrac{2I(n,m)}{q} \right\} + \dfrac{q}{2}, \\ \qquad\qquad \text{if } \widehat{W}(m,n) = 1; \end{cases}$$

where

$$\widehat{W}_b(n,m) = W_b\big([n\backslash L],[m\backslash L]\big) \oplus \\ \oplus K\big(\{n\backslash L\},\{m\backslash L\}\big)$$

is the "key-scrambled" watermark and $\oplus$ is a "exclusive OR" (or "XOR") operator.

If q is known at receiving end and host image has not been modified, the watermark pixel $W'_b(u,v)$ can be extracted from the host image block $I'_b(n,m)$ using the two-step extraction procedure.

1. Extracted "key-scrambled" watermark image $\widehat{W}'_b(n,m)$ is calculated using the equation

$$\widehat{W}'_b(n,m) = \begin{cases} 0, \text{ if } \left\{ \dfrac{I'(n,m)}{q} \right\} < \dfrac{q}{2}; \\ 1, \text{ if } \left\{ \dfrac{I'(n,m)}{q} \right\} \geqslant \dfrac{q}{2}; \end{cases}$$

2. The extracted and "de-scrambled" watermark image $W'_b(u,v)$ is calculated using the following expression

$$W'_b(u,v) = \begin{cases} 0, \text{ if } \forall m,n : \widehat{W}'_b(n,m) \oplus \\ \qquad \oplus K\left(\left\{\dfrac{n}{L}\right\},\left\{\dfrac{m}{L}\right\}\right) = 0; \\ 1, \text{ if } \forall m,n : \widehat{W}'_b(n,m) \oplus \\ \qquad \oplus K\left(\left\{\dfrac{n}{L}\right\},\left\{\dfrac{m}{L}\right\}\right) = 1; \\ \text{not defined,} \quad \text{otherwise;} \end{cases}$$

where $n \in [u \cdot L, u \cdot (L+1)], m \in [v \cdot L, v \cdot (L+1)]$.

One or more "not defined" values of $W'_b(u,v)$ means that the corresponding host image block has been modified after watermark embedding and therefore watermark bit can't be extracted from the host image. In fact, evaluation of the $W'_b(u,v)$ combines watermark image extraction and detection of a modified host image block (in case $W'_b(u,v)$ is not defined).

Also, in an actual practice a host image can be modified using the contrast enhancement, cropping and rotation operators, which does not tamper a visible content of an image. Nevertheless, in this case the watermark can't be extracted from a modified host image using the existing QIM algorithm or the detection algorithm proposed earlier in this section. The following block-based watermark extraction algorithm was developed to overcome this limitation of existing schemes.

1. The intensity histogram $H_0(b)$ is built for all intensity values of selected host image block pixels $I'_b(n,m)$ meeting the condition $K\left(\{n/L\},\{m/L\}\right) = 0$ In a similar way the histogram $H_1(b)$ is built for all pixels intensity values of a selected host image block $I'_b(n,m)$ meeting the condition $K\left(\{n/L\},\{m/L\}\right) = 1$.
2. After that, for every block the following expression is evaluated.

$$D(u,v) = \begin{cases} 0, & \text{if } \sum_b (H_0(b) \cdot H_1(b) = 0); \\ 1, & \text{if } \sum_b (H_0(b) \cdot H_1(b) > 0). \end{cases}$$

The binary image $D(u,v)$ represents a map of a tampered host image blocks ($D(u,v) = 0$ in the case of a non-tampered block and $D(u,v) = 1$ in the case of a tampered block).

Also, a watermark pixel (bit) extraction from a corresponding host image block can be performed by comparing $H_0(b)$ and $H_1(b)$ for this block.

To perform watermark extraction from rotated by 90°-fold angle the following restriction is introduced during the "key image" $K(i,j)$ generation:

$$\forall i,j \in [1, L/2]: \; K(i,j) = K(L-j,i) = \\ = K(L-i, L-j) = K(j, L-i).$$

The sample of a key image built using this restriction is shown in Figure 1.

If a host image has been cropped and initial block positions were moved, the following block-based watermark detection algorithm allows to detect a watermark.

1. For all integer $\Delta n, \Delta m \in [0, L-1]$ a histogram set $H_0(\Delta n, \Delta m, b)$is built for a selected block using all pixels intensity values of a selected host image block $I_b^{'}(n,m)$ meeting the condition $K\left(\left\{\frac{n+\Delta n}{L}\right\}, \left\{\frac{m+\Delta m}{L}\right\}\right) = 0$. By a similar way the histogram set $H_1(\Delta n, \Delta m, b)$ is built.
2. For a selected host image block the value of a tampered host image blocks map is computed as

$$D(u,v) = \begin{cases} 0, \text{ if } \min\limits_{\Delta n, \Delta m} \sum\limits_b H_{01}(\Delta n, \Delta m, b) = 0, \\ 1, \text{ if } \min\limits_{\Delta n, \Delta m} \sum\limits_b H_{01}(\Delta n, \Delta m, b) > 0, \end{cases}$$

where

$$H_{01}(\Delta n, \Delta m, b) = H_0(\Delta n, \Delta m, b) \cdot H_1(\Delta n, \Delta m, b).$$

Also, a watermarking pixel (bit) extraction from a corresponding host image block can be performed by comparing $H_0(b)$ and $H_1(b)$ for this block.

Examples

In this section some examples illustrating the work of the proposed algorithm and watermark features are presented. Binary watermark image (64×64 pixels size) has been embedded into grayscale host image "Lena" (1024×1024 pixels size, Figure 2a) size. Pseudo-random key image (16×16 pixels size) was generated according to restrictions described in Section 4 and used for embedding.

After that, host image was subjected sequentially to the set of image modification operations: cropping (with moving initial block positions, Figure 2b), contrast enhancement (Figure 2c) and rotation by 90 degrees counter-clockwise (Figure 2d).

Watermarks extracted from all host images are presented in Figure 3 (Figure 3a corresponds host image in Figure 2a, etc.). The extracted watermark in Figure 3a (unmodified host image) is completely equal to the original embedded watermark (not shown).

After that, a variety of image tempering techniques were applied to a host image shown in Figure 3d.

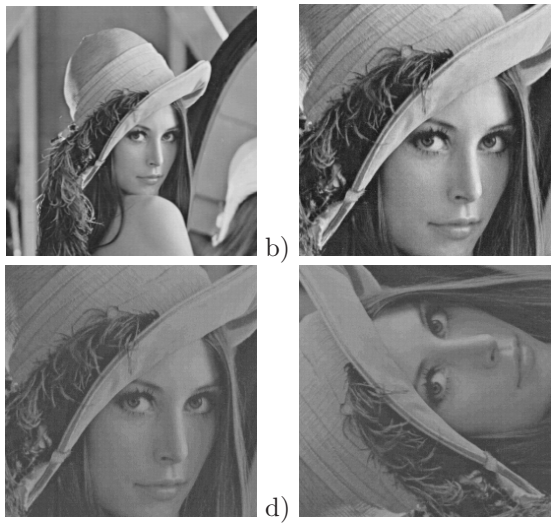


Fig. 2. Host image "Lena" used for watermark embedding: a) host image after watermark embedding; b) host image with embedded watermark after cropping; c) host image with embedded watermark after cropping and contrast enhancement; d) host image with embedded watermark after cropping, contrast enhancement and rotation.

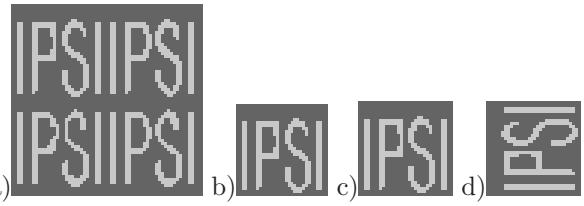


Fig. 3. Extracted watermark image: a) watermark extracted from the image shown in Figure 2a; b) watermark extracted from the image shown in Figure 2b; c) watermark extracted from the image shown in Figure 2c; d) watermark extracted from the image shown in Figure 2d.

1. The block 1 (shown in Figure 4a) has been distorted by an additive gaussian white noise with a standard deviation parameter $\sigma = 15$.
2. The block 2 has been blurred using Gaussian blur kernel with a standard deviation parameter $\sigma_p = 5$
3. The block 3b has been replaced by the block 3a.

The resulting tampered image is shown in Figure 4a. The watermark extraction and image tampered detection were performed for this tampered image. Results of the image tampering detection are presented in Figure 4b and extracted watermark is shown in Figure 4c.

Obtained results demonstrates the proposed watermark robustness to selected set of an image modification techniques (cropping, contrast enhancement, rotation), and at the same time shows a watermark property of block-wise host image tampering detection for modified host image.

Also, tampering of a host image blocks does not prevent watermark extraction from non-tampered blocks.

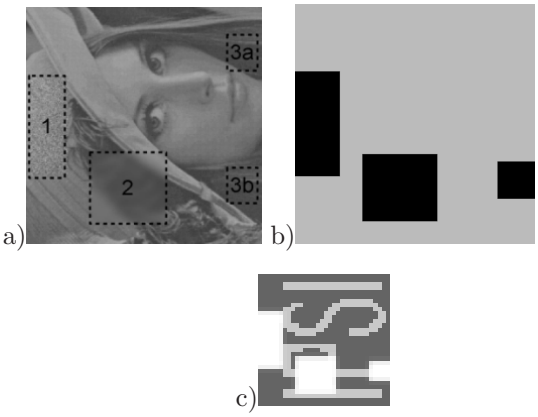


Fig. 4. Results of the image tampering detection and watermark extraction: a) tampered host image; b) tampered blocks map for host image shown in Figure 4a (tampered blocks are shown black); c) Extracted watermark for host image shown in Figure 4a (a watermark bits erased because of host image tampering are shown white).

Conclusion

The new block-wise watermarking algorithms is proposed, which has a number of advantages compared to known watermarking algorithms.

1. Proposed block-wise algorithm allows to embed a hidden user-defined watermark in a host image and at the same time provides a host image authentication for block-based tampering detection
2. Embedded watermark is robust to a host image cropping, rotation by 90° angle and contrast enhancement.
3. Proposed algorithm does not require an additional computationally-intensive watermarking encryption procedure for watermark image randomization

References

[1] *Cox I. J., Miller M., Bloom J.* Digital watermarking and steganography — Morgan Kaufmann, 2008.

[2] *Fridrich J.* Methods for Tamper Detection in Digital Images // USA,Orlando, Proc. of ACM International Multimedia Conference , 1999 — Pp. 29–34.

[3] *Chen B.* Design and Analysis of Digital Watermarking, Information Embedding, and Data Hiding Systems // USA,Massachusetts Institute of Technology, PhD thesis, 2000 — Pp. 29–34.

[4] *Lin E. T., Delp E. J.* A review of fragile image watermarks // Proc. ACM Multimedia and Security Workshop, 1999 — Pp. 25–29.

[5] *Chen B., Wornell G. W.* Implementations of quantization index modulation methods for digital watermarking and information embedding // Journal of VLSI Signal Processing Systems for Signal, Image, and Video Technology, Special Issue on Multimedia Signal Processing, vol.27, 2001 — Pp. 7–33.

Contour's blur determination method for the digital images

Koltsov P. P.
NIISI RAN, Moscow, Russian Federation

Comparative studies on a number of popular image preprocessing algorithms demonstrated their significantly different performance dependent on the image quality. Therefore, the right choice of an adequate algorithm requires an introduction of image quality measures as well as effective methods to compute them. This paper is devoted to sharpness measurement and outlines a method of its calculation.

Introduction

One of the main difficulties in the digital images processing is the presence of interference and lack of sharpness. In [1, 2] there were conducted comparative studies for implementations of the most popular preprocessing methods of the digitized images. These studies included testing procedure on the set of specially designed test images with the interference of various types and levels for each method. Based on these results, one can develop guidelines for choosing the most suitable algorithm for the specific conditions. However, the practical application of these results is difficult because of the absence of a priori information about image formation conditions.

In this paper a direct method for the image blur estimation is proposed. The method is based on line detector, which was introduced in [3, 4]. The essence of the detector is a local approximation of the digitized image in the special windows by simple step function. In general, this function consists of three steps. The border steps correspond to an outer homogeneous area and the step between them corresponds to the border between the outer areas. In the special case, when that border is sharp, the width of the middle step is equal to zero, and it will be only two steps for approximation function, like in [5].

Suggested approach

Let **D** be a special round–like window. Tables 1 and 2 shows the examples of the most typical kind of such windows.

Let $D = \{(x, y) \mid x^2 + y^2 \leqslant 1\}$ be a unit circle, best fits the window **D**; $I(x, y)$ — discrete illumination function, redefined on the circle D. In [4] a parameterized family of step functions

$$S = S(x, y, c_x, c_y, r_-, r_+, t_-, t_+, b_-)$$

was defined on the set D. The proximity$\|I - S\|^2$ of I and S was defined as

$$\iint_D \big(I(x, y,) - S(x, y, c_x, c_y, r_-, r_+, t_-, t_+, b_-)\big)^2 dx\, dy.$$

Therefore, the approximation problem was reduced to determination of values $c_x, c_y, r_-, r_+, t_-, t_+, b_-$ which minimize the above criteria. The approximate solution of the problem was found and the ratio $\|I-S\|^2/\ \|S\|^2$ was taken as an approximation acceptability measure.

Table 1. Typical window #1.

		1	2	3	4		
	5	6	7	8	9	10	
11	12	13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25	26
27	28	29	30	31	32	33	34
35	36	37	38	39	40	41	42
	43	44	45	46	47	48	
		49	50	51	52		

Table 2. Typical window #2.

		1	2	3	4	5		
	6	7	8	9	10	11	12	
13	14	15	16	17	18	19	20	21
22	23	24	25	26	27	28	29	30
31	32	33	34	35	36	37	38	39
40	41	42	43	44	45	46	47	48
49	50	51	52	53	54	55	56	57
	58	59	60	61	62	63	64	
		65	66	67	68	69		

On base of the above result it is possible to construct blur measure for the digital images. Our case of interest will be the one, when the height/brightness of the central step is intermediate the heights of the steps on both sides of it. Let$\{R\}$ be parameterized family of continuous functions defined on the set

$$D, R = R(x, y, c_x, c_y, r_-, r_+, t_-, t_+, b_-),$$

where all parameters are the same with the parameters of step functions S. Functions R are obtained from functions S by replacing the central steps by slope plane, continuously connecting corresponding edges of the side steps. Assume that the best approximation S for the input signal I is found, and R is the corresponding continuous function from $\{R\}$. If $\|I - S\|^2 > \|I - R\|^2$, the function R gives a better approximation quality for the input signal then S. In this case the processing result will be not a line but a region between two areas with different illumination. Approximation acceptability measure must be modified as $\|I-R\|^2/\|R\|^2$. The calculated width of the central step is practically independent of the brightness' difference of these areas, and defines a smooth transition between them. Nevertheless, the results obtained

within a single window, can not be considered as an integral measure of the image blur. More appropriate measure could be obtained by analyzing minimal distance between two areas with different illumination over all possible windows of D on a given digitized image. In practice, however, it will be enough to take image covering by windows with the degree of overlap of 25–30%.

Summary

A direct method for the image blur estimation is proposed. An integral measure of the image blur could be obtained by analyzing distance between adjacent areas with different illumination.

References

[1] *Gribkov I., Koltsov P., Kotovich N., Kravchenko A., Kutsaev A., Nikolaev V., Zakharov A.* PICASSO — Edge Detectors Evaluating System Based on the Comprehensive Set of Artificial Images //6th World Multiconf. on Systemics, Cybernetics and Informatics 2002. — Vol. 9. — Pp. 88–93.

[2] *Gribkov I., Koltsov P. Kotovich N., Kravchenko A., Kutsaev A., Osipov A., Zakharov A.* Empirical Evaluation of Image Processing Methods Using PICASSO 2 System // WSEAS Transactions on Systems 2005. — Vol. 4., No. 5. — Pp. 1923–1930.

[3] *Hueckel M. H.* A local visual operator which recognizes edges and lines // Journal of the Association for Computing Machinery. — 1973. — Vol. 20, No. 4. — Pp. 634–647.

[4] *Hueckel M. H.* Erratum: A local visual operator which recognizes edges and lines // Journal of the Association for Computing Machinery. — 1974. — Vol. 21, No. 2. — Pp. 350.

[5] *Hueckel M. H.* An operator which locates edges in digitized pictures // Journal of the Association for Computing Machinery. — 1973. — Vol. 18, No. 1. — Pp. 113–125.

Fast recognition of 2D objects represented by the trees of primitives*

Lange M., Ganebnykh S.
lange_mm@ccas.ru
Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russia

A new approach to pattern recognition in a space of tree-structured multiresolution pattern representations is developed. This approach includes a technique of learning a classifier and a fast algorithm of searching for a decision. Efficient applications in signature and gesture recognition are shown by experimental results.

Introduction

In many applications of pattern recognition, it is necessary to provide a minimum value of error probability subject to a given cost of computational complexity. This task can be solved by using multiresolution pattern representations and particularly tree-structured pattern representations [1, 2]. It is desirable to use the equitype tree-structured representations that yield the approximately invariant descriptions for a wide class of 2D patterns given by images. In [3], we proposed a technique of constructing the invariant tree-structured representations that are suitable for both line-based and region-based patterns so as signatures, gestures, handwritten sings, fingerprints, silhouettes, and others.

In this paper, we consider two tasks, namely, learning a classifier and accelerating a search for recognition decision in a space of tree-structured pattern representations. An efficiency of the proposed approach is confirmed by experimental results on signature and hand gesture recognition.

Formalization of the problem

We consider 2D objects given by grayscale images and represented by multiresolution descriptions. Let $\mathbf{A}^L$ be a set of the objects. Each object is represented by L-level sequence of descriptions

$$A^L = (a^0, \ldots, a^l, \ldots, a^L) \in \mathbf{A}^L, \qquad (1)$$

where a^l is a description of the l-th resolution level and A^l is the l-level subsequence in A^L. The set $\mathbf{A}^L$ contains the objects belonging to $K+1$ classes so that $\mathbf{A}^L = \{\mathbf{A}_i^L\}_{i=0}^K$, where each class $\mathbf{A}_i^L$ of the positive number includes all possible semantically allied objects of the form (1) whereas the zero class $\mathbf{A}_0^L$ combines all other objects. For learning a classifier, we use a training set

$$\mathbf{B}^L = \Big\{\mathbf{B}_i^L = \big\{B_{ij}^L\big\}_{j=1}^{m_i}\Big\}_{i=0}^K \subset \mathbf{A}^L, \qquad (2)$$

where $\mathbf{B}_i^L$ is the i-th cluster of size m_i and, in some cases, the zero cluster $\mathbf{B}_0^L$ can be absent.

Suppose that for any pair of the objects $A^L \in \mathbf{A}^L$ and $B_{ij}^L \in \mathbf{B}^L$ there is a distinction measure

$$D_l(A^L, B_{ij}^L) = D(A^l, B_{ij}^l) \qquad (3)$$

of the l-th order, which gives the distinction value between the l-level subsequences $A^l \in A^L$ and $B_{ij}^l \in B_{ij}^L$. Given object $B_{ij}^L \in \mathbf{B}_i^L$, $i \neq 0$, the measure (3) allows us to define an l-level sphere

$$S_{D_l^*}(B_{ij}^L) = \big\{A^L \colon D_l(A^L, B_{ij}^L) \leqslant D_l^*(B_{ij}^L)\big\} \qquad (4)$$

for $l = 0, \ldots, L$. Here, the center of the sphere is the l-level subsequence B_{ij}^l in B_{ij}^L and the size parameter $D_l^* = D_l^*(B_{ij}^L)$ is evaluated by the measure (3).

Within the nonzero clusters of the training set (2), we select a set of templates

$$\widehat{\mathbf{B}}^L = \Big\{\widehat{\mathbf{B}}_i^L = \big\{\widehat{B}_{ij}^L\big\}_{j=1}^{\hat{m}_i}\Big\}_{i=1}^K, \qquad (5)$$

where $\widehat{\mathbf{B}}_i^L$ is a group of size $\hat{m}_i \leqslant m_i$ selected in the i-th cluster $\widehat{\mathbf{B}}_i^L \subset \mathbf{B}^L$. Regarding each l-level template $\widehat{B}_{ij}^l \in \widehat{B}_{ij}^L$ as the center of the sphere (4), all template spheres in (5) generate a multiresolution description of the nonzero classes in $\mathbf{A}^L$ as follows

$$\mathbf{S}_{\mathbf{D}^*} = \Big\{\mathbf{S}_{\mathbf{D}_l^*}(\widehat{\mathbf{B}}^L) = \Big\{\big\{S_{D_l^*}(\widehat{B}_{ij}^L)\big\}_{j=1}^{\hat{m}_i}\Big\}_{i=1}^K\Big\}_{l=0}^L, \qquad (6)$$

where the size parameters yield a set

$$\mathbf{D}^* = \Big\{\mathbf{D}_l^*(\widehat{\mathbf{B}}^L) = \Big\{\big\{D_l^*(B_{ij}^L)\big\}_{j=1}^{\hat{m}_i}\Big\}_{i=1}^K\Big\}_{l=0}^L. \qquad (7)$$

Using the distinction measure (3) and the description of the classes given by (6) and (7), we define a similarity measure of the l-th order between an object $A^L \in \mathbf{A}^L$ and the group $\widehat{\mathbf{B}}_i^L$ in (5) as follows

$$\mu_l(A^L, \widehat{\mathbf{B}}_i^L) = \sum_{j=1}^{\hat{m}_i} q_l(\widehat{B}_{ij}^L) e^{-D_l(A^L, \widehat{B}_{ij}^L)} z(A^L, \widehat{B}_{ij}^L), \qquad (8)$$

where $z(A^L, \widehat{B}_{ij}^L) = \big[D_l(A^L, \widehat{B}_{ij}^L) \leqslant D_l^*(\widehat{B}_{ij}^L)\big]$ is an indicator and $q_l(\widehat{B}_{ij}^L)$, $j = 1, \ldots, \hat{m}_i$, are the weights of templates of the group $\widehat{\mathbf{B}}_i^L$ in (5).

The similarity measure (8) yields a voting-based value in favor of belonging an object A_i^L to the i-th class $\mathbf{A}_i^L$ subject to this value is evaluated via the l-level representations of both the object and the group of templates $\widehat{\mathbf{B}}_i^L$. In terms of the similarity measure (8) taken at the maximum resolution level L, a voting-based criterion of finding a class number of the submitted object A^L is given by

$$c = \Big[\max_{i=1}^K \mu_L(A^L, \widehat{\mathbf{B}}_i^L) > 0\Big] \arg\max_{i=1}^K \mu_L(A^L, \widehat{\mathbf{B}}_i^L). \qquad (9)$$

This work was supported by the RFBR grants 09-01-00573-a, and 09-07-00368-a

If $\mu_L(A^L, \widehat{\mathbf{B}}_i^L) = 0$ for all $i = 1, \ldots, K$, the criterion (9) yields the decision $c = 0$, which identifies the object A^L with the zero class $\mathbf{A}_0^L$.

Let $\varepsilon_{\mathbf{B}^L}\big(\widehat{\mathbf{B}}^L, \mathbf{D}_L^*(\widehat{\mathbf{B}}^L)\big)$ and $\varepsilon_{\mathbf{A}^L\setminus\mathbf{B}^L}\big(\widehat{\mathbf{B}}^L, \mathbf{D}_L^*(\widehat{\mathbf{B}}^L)\big)$ be the error rates of the classifier subject to submitted objects are taken from the training set $\mathbf{B}^L$ and the test set $\mathbf{A}^L \setminus \mathbf{B}^L$, respectively. Then, our goal consists in selecting the set of the templates $\widehat{\mathbf{B}}^L$ together with the set of the sphere sizes $\mathbf{D}_L^*(\widehat{\mathbf{B}}^L)$ that give a minimum value of the learning error rate $\varepsilon_{\mathbf{B}^L}\big(\widehat{\mathbf{B}}^L, \mathbf{D}_L^*(\widehat{\mathbf{B}}^L)\big)$. Also, it is necessary to provide a small absolute difference value

$$\big|\varepsilon_{\mathbf{A}^L\setminus\mathbf{B}^L}\big(\widehat{\mathbf{B}}^L, \mathbf{D}_L^*(\widehat{\mathbf{B}}^L)\big) - \varepsilon_{\mathbf{B}^L}\big(\widehat{\mathbf{B}}^L, \mathbf{D}_L^*(\widehat{\mathbf{B}}^L)\big)\big|.$$

Within the bounds of such approach, we construct an optimum classifier in a space of the object representations of the form (1) as well as we propose the fast decision algorithm by the criterion (9). An efficiency of the classifier is shown by experimental results on signature and gesture recognition in terms of the error rates $\varepsilon_{\mathbf{B}^L}$ and $\varepsilon_{\mathbf{A}^L\setminus\mathbf{B}^L}$.

Tree-structured pattern representations

Here, we use tree-structured multiresolution pattern representations that have been constructed in [3]. These representations are intended for the patterns given by compact or distributed 2D solids within the grayscale images. Each such pattern is represented by the following L-level complete binary tree of elliptic primitives

$$A^L = \big\{Q_n,\, n = 0, \ldots, n_L\big\}, \tag{10}$$

where $n \to (2n+1, 2n+2)$, the primitive Q_n takes the n-th node at the level $l = \lfloor \log(n+1) \rfloor$, and $l = 0, \ldots, L$. Moreover, each primitive is regarded as a set of parameters

$$Q_n = (\mathbf{r}_n, \mathbf{u}_n, \mathbf{v}_n, z_n)\,, \tag{11}$$

where $\mathbf{r}_n$ and $(\mathbf{u}_n, \mathbf{v}_n)$ are the vectors of the primitive center and principal axes, respectively, and z_n is the primitive brightness value. The parameters (11) of each primitive Q_n in (10) are given in the pattern principal axes as well as they are normalized by the parameters of the root primitive Q_0. Since the layers of the primitives in the tree (10) generate all l-level pattern descriptions a^l, $l = 0, \ldots, L$, the pattern representation (10) is equivalent to the l-level sequence of the form (1).

A class of admissible objects and a property of the proposed representation are defined by

Proposition 1. A set of pixels yields an admissible pattern if this set is given by 2D solid that possesses a unique pair of principal axes.

Proposition 2. For sufficiently small size of pixel, the tree-structured pattern representations (10) are approximately invariant with respect to pattern translation, rotation, size and brightness scaling.

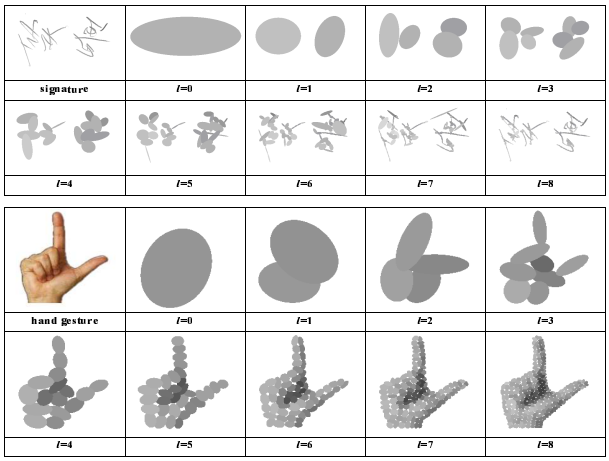


Fig. 1. Examples of the tree-structured representations for line-based signature and region-based gesture.

Fig. 1. shows the examples of the representations.

The distinction measure of the form (3) is defined as a modification of the measure proposed in [3]. Let $A^l \cap B^l$ be an intersection that is defined by all pairs of the corresponding primitives $Q_n^a = (\mathbf{r}_n^a, \mathbf{u}_n^a, \mathbf{v}_n^a, z_n^a)$ and $Q_n^b = (\mathbf{r}_n^b, \mathbf{u}_n^b, \mathbf{v}_n^b, z_n^b)$ of the form (11) in the subtrees $A^l \in A^L$ and $B^l \in B^L$, respectively. Given pair (A^L, B^L), we define three distinction functions

$$d_{lk}(A^L, B^L) = \sum_{n:\ (Q_n^a, Q_n^b)\in A^l\cap B^l} w_n \rho_k(Q_n^a, Q_n^b), \tag{12}$$

$k = 1, 2, 3$, where the nonnegative difference functions

$$\rho_1(Q_n^a, Q_n^b) = \rho_r(\mathbf{r}_n^a, \mathbf{r}_n^b),$$

$$\rho_2(Q_n^a, Q_n^b) = \rho_{u,v}(\mathbf{u}_n^a, \mathbf{u}_n^b; \mathbf{v}_n^a, \mathbf{v}_n^b),$$

$$\rho_3(Q_n^a, Q_n^b) = \rho_z(z_n^a, z_n^b),$$

and the weight w_n of (Q_n^a, Q_n^b) are given in [3].

The distinction functions (12) allow us to define the measure (3) as an average

$$D_l(A^L, B^L) = \sum_{k=1}^{3} \omega_k d_{lk}(A^L, B^L), \tag{13}$$

where the weights $\omega_k \geqslant 0$ are fixed for $l = 0, \ldots, L$. Also, due to additivity of the functions (12), the distinction value $D_{l+1}(A^L, B^L)$ can be calculated from the value $D_l(A^L, B^L)$ recurrently.

Selection of templates

Selection of the set of templates (5) needs the measure (13) and therefore it is necessary to estimate the weights ω_k, $k = 1, 2, 3$. This procedure is performed by using three distinction matrices

$$\mathbf{d}_{Lk} = \Big\{\big\{d_{Lk}(B_{i'j'}^L, B_{ij}^L)\big\}_{j,j'=1}^{m_i}\Big\}_{i,i'=0}^{K} \tag{14}$$

of size $\sum_{i=0}^{K} m_i \times \sum_{i=0}^{K} m_i$, $k = 1, 2, 3$. The elements of each matrix (14) are equal to values of the corresponding function (12) for all pairs $(B^L_{i'j'}, B^L_{ij}) \in \mathbf{B}^L$ taken at the L-th resolution level. Using the matrix (14) of a given number k, we find a covering sphere of minimum size in each cluster $\mathbf{B}^L_i \subset \mathbf{B}^L$ of number $i > 0$. For $\mathbf{B}^L_i$, this sphere is determined by the cluster center and variance as follows

$$B^L_{ij_k} = \arg \min_{j=1}^{m_i} \max_{j'=1}^{m_i} d_{Lk}(B^L_{ij'}, B^L_{ij}), \tag{15}$$

$$d^*_{Lk}(B^L_{ij_k}) = \min_{j=1}^{m_i} \max_{j'=1}^{m_i} d_{Lk}(B^L_{ij'}, B^L_{ij}). \tag{16}$$

So, a set of the covering spheres with the parameters (15) and (16) taken over all K clusters generates a classifier by the criterion (9), in which only the k-th distinction function (12) of the L-th order is used. Submitting all objects of the training set (2) to each such classifier and making the decisions, we evaluate the total error probabilities e_k (FAR + FRR) for $k = 1, 2, 3$. These probabilities are evaluated as the averages of conditional empirical risks over own and alien objects taken with a given distribution P_{own} and $P_{\text{alien}} = 1 - P_{\text{own}}$. Summation of the distinction matrices (14) with the weights $\omega_k = -\log e_k$ yields a full matrix of the distinction values by the measure (13) of the L-th order. This matrix is given by

$$\mathbf{D}_L = \left\{ \left\{ D_L(B^L_{i'j'}, B^L_{ij}) \right\}_{(j',j)=1}^{m_i} \right\}_{i',i=0}^{K}. \tag{17}$$

The matrix (17) is used for selecting the templates in all nonzero clusters of the training set (2). The template selection procedure processes the clusters independently on each other. For each cluster $\mathbf{B}^L_i$ of size m_i, $i = 1, \ldots, K$, this procedure constructs an optimum covering as a set of the spheres $\mathbf{S}_{\mathbf{D}^*_L}(\widehat{\mathbf{B}}^L_i) = \left\{ S_{D^*_L}(\widehat{B}^L_{ij}) \right\}_{j=1}^{\hat{m}_i}$ that provides a minimum value of the i-th error rate contribution $\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{B}^L}\left(\widehat{\mathbf{B}}^L_i, \mathbf{D}^*_L(\widehat{\mathbf{B}}^L_i)\right)$. The above procedure includes an original dichotomic algorithm, which constructs a sequence of the above coverings for $\hat{m}_i = 1, \ldots, m_i - 1$ so that the sphere sizes $\mathbf{D}^*_L(\widehat{\mathbf{B}}^L_i) = \left\{ D^*_L(\widehat{B}^L_{ij}) \right\}_{j=1}^{\hat{m}_i}$ depend on a parameter $\alpha_i \in [0, 1]$. At each dichotomic step, the cluster segment, which is covered by the sphere of the largest size D^*_L, is partitioned into two new segments and the sphere of the partible segment is replaced by a pair of covering spheres for the new segments. The center $\widehat{B}^L_{ij}$ of the sphere $S_{D^*_L}(\widehat{B}^L_{ij})$ of each new segment is determined similarly to (15), where the distinction value $d_{Lk}(B^L_{i'j'}, B^L_{ij})$ is replaced by the corresponding element $D_L(B^L_{i'j'}, B^L_{ij})$ of the matrix (17).

Given center $\widehat{B}^L_{ij}$ of the current segment, the size of its covering sphere is determined as follows

$$D^*_L(\widehat{B}^L_{ij}) = (1 - \alpha_i) D_L(B^L_{ij'}, \widehat{B}^L_{ij}) + \alpha_i D_L(B^L_{ij''}, \widehat{B}^L_{ij}),$$

where $B^L_{ij'}$ and $B^L_{ij''}$ are the most distant objects with respect to $\widehat{B}^L_{ij}$ that are taken in the current segment and its paired segment, respectively, and α_i is a given value of the parameter. At the zero step, the total cluster is covered by the sphere that size does not depend on α_i and equal to $D_L(B^L_{ij'}, \widehat{B}^L_{ij})$.

The above dichotomic algorithm works together with the known leave-one-out cross-validation algorithm [4]. In the result, for each cluster $\mathbf{B}^L_i \subset \mathbf{B}^L$, $i = = 1, \ldots, K$, we obtain an estimation of the i-th error rate contribution $\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{B}^L}\left(\widehat{\mathbf{B}}^L_i, \mathbf{D}^*_L(\widehat{\mathbf{B}}^L_i)\right) = \varepsilon^{(i)}_{\mathbf{B}^L}(\hat{m}_i, \alpha_i)$ as a function of $\hat{m}_i$ and α_i. Minimization of this function gives an optimum pair

$$(\hat{m}^*_i, \alpha^*_i) = \arg \min_{\hat{m}_i, \alpha_i} \varepsilon^{(i)}_{\mathbf{B}^L}(\hat{m}_i, \alpha_i).$$

The function $\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{B}^L}(\hat{m}_i, \alpha_i)$ includes FRR and FAR errors that are caused by own and alien objects submitted to the group $\widehat{\mathbf{B}}^L_i$ with parameters $\mathbf{D}^*_L(\widehat{\mathbf{B}}^L_i)$. Thus, given α^*_i and $1 \leqslant \hat{m}_i \leqslant \hat{m}^*_i$, $i = 1, \ldots, K$, an estimation of the total error rate as a function of $\hat{m}_1, \ldots, \hat{m}_K$ is defined by the following average

$$\varepsilon_{\mathbf{B}^L}(\hat{m}_1, \ldots, \hat{m}_K) = \sum_{i=1}^{K} \varepsilon^{(i)}_{\mathbf{B}^L}(\hat{m}_i, \alpha^*_i) \frac{m_i}{\sum_{i=1}^{K} m_i}, \tag{18}$$

where the values $\varepsilon_{\mathbf{B}^L}$ belong to a segment $[\varepsilon_{\min}, \varepsilon_{\max}]$.

Using the proposed template selection procedure, we construct a set of the covering spheres (6) with size parameters (7). Due to the multiresolution property, a set of the centers of the these spheres yields a multilevel base of the templates

$$\widehat{\mathbf{B}}^0, \ldots, \widehat{\mathbf{B}}^l, \ldots, \widehat{\mathbf{B}}^L, \tag{19}$$

where $\widehat{\mathbf{B}}^l = \left\{ \left\{ \widehat{B}^l_{ij} \right\}_{j=1}^{\hat{m}_i} \right\}_{i=1}^{K}$ and $\mathbf{D}^*(\widehat{\mathbf{B}}^l) = \mathbf{D}^*_l(\widehat{\mathbf{B}}^L)$.

Fast decision algorithm

The proposed fast decision algorithm is based on reducing search areas in successive levels of the base (19). To realize this algorithm, we use a function

$$K_l = \lfloor K 2^{-\beta l} \rfloor, \; l = 0, \ldots, L \tag{20}$$

with a parameter $\beta = \frac{1}{L} \log(K/K_L)$, where $K_L \geqslant 1$ is a given value. The function (20) determines a number of the groups of templates that are analyzed by the similarity measure (8) in the l-th level of the base (19). Thus, in $\widehat{\mathbf{B}}^l$, the similarity measure of the l-th order (8) is calculated for K_l groups of the templates and K_{l+1} groups of the largest values of this measure are selected for the next processing in $\widehat{\mathbf{B}}^{l+1}$. The final decision of the form (9) is made in $\widehat{\mathbf{B}}^L$ over K_L groups selected in $\widehat{\mathbf{B}}^{L-1}$. As opposed to the proposed fast search decision algorithm, the full search algorithm calculates the decision over all K groups of the templates taken in $\widehat{\mathbf{B}}^L$.

Table 1. Experimental estimations of error rates (%) for signature and gesture recognition.

error rates	signatures originals		signatures originals + forgeries		hand gestures	
	TRAIN	TEST	TRAIN	TEST	TRAIN	TEST
FAR own	0,00	0,25	1,04	1,38	0,00	0,27
FRR own	1,34	1,75	5,63	8,38	1,58	2,13
FAR alien	1,34	1,50	6,46	6,63	1,05	1,33

For both decision algorithms, we define their computational complexity by a number of processed nodes in the base (19) per one class. So, taking into account the function (20) in the fast algorithm, we obtain the upper bounds to the complexity of the fast and full search algorithms as follows

$$C^{\text{fast}} \leqslant \sum_{l=0}^{L} 2^{(1-\beta)l} \max_{i=1}^{K} \hat{m}_i, \qquad C^{\text{full}} \leqslant (2^{L+1}-1) \max_{i=1}^{K} \hat{m}_i. \tag{21}$$

To express the bounds (21) as functions of the parameters ε and K, we define a rate-epsilon function $R_\varepsilon = \frac{1}{L+1} \log \max_{i=1}^{K} \hat{m}_i$ subject to a total number of the templates $M_\varepsilon = \sum_{i=1}^{K} \hat{m}_i$ provides the error rate (18) equal to $\varepsilon \in [\varepsilon_{\min}, \varepsilon_{\max}]$. Assumed that L is taken by some constraints and using the inequality $\max_{i=1}^{K} \hat{m}_i \leqslant \max_{i=1}^{K} m_i$, the bounds (21) satisfy

Proposition 3. Given parameters $K > K_L \geqslant 1$ and the training set of size $M = \sum_{i=1}^{K} m_i$, let L be taken so that $\max_{i=1}^{K} m_i \leqslant 2^L \leqslant K/K_L$. Then

$$C^{\text{fast}} \leqslant (2K^*)^{R_\varepsilon} \left(1 + \log K^*\right);\ C^{\text{full}} \leqslant (2K^*)^{R_\varepsilon + 1},$$

where $K^* = K/K_L$, R_ε does not increase in the segment $[\varepsilon_{\min}, \varepsilon_{\max}]$, and $0 \leqslant R_\varepsilon \leqslant 1$.

Experimental results

The proposed classifier has been applied for signature and hand gesture recognition. The source signatures and gestures are taken from the databases [5] and [6], respectively, and the patterns are given by the grayscale images of sizes 512×512×8 for signatures and 256×256×8 for gestures.

In the signature recognition experiment, there are 1600 objects, namely, 800 originals taken from 40 persons and 800 forgeries taken from 40 false persons. The above objects are equally divided in to the training set $\mathbf{B}^L$ and the test set $\mathbf{A}^L \setminus \mathbf{B}^L$ so that, for each of them, $K = 80$ and $m_i = 10,\ i = 1, \ldots, K$. The signatures are represented by L-level trees, where $L = 10$.

In the gesture recognition experiment, there are 750 objects taken from 25 classes. The objects are equally divided into the sets $\mathbf{B}^L$ and $\mathbf{A}^L \setminus \mathbf{B}^L$ so that, for each set, $K = 25$ and $m_i = 15$, $i = 1, \ldots, K$. The gestures are represented by L-level trees, where $L = 6$.

In both experiments, $\beta = 1$ and $K_L = 1$.

The above experiments are performed by the following scheme. Using the set $\mathbf{B}^L$ at the learning stage, we construct the base of the templates (19) and obtain estimations of FAR and FRR error rate components. At the test stage, the objects of the set $\mathbf{A}^L \setminus \mathbf{B}^L$ are submitted to the created classifier and the values of the error rate components are evaluated. For both learning and test stages, two modes are emulated by submitting own and alien objects subject to $P_{\text{own}} = P_{\text{alien}} = 0,5$. The results are given in Table 1.

Conclusion

The problem of learning the classifier in the original space of tree-structured object representations has been developed. The proposed solution is based on covering a training set by a set of multiresolution spheres. Using the multiresolution property of the representations, the fast decision algorithm has been proposed and the upper bound to its computational complexity has been found.

The developed approach was applied to signature and gesture recognition. The experiments showed sufficiently low error rate characteristics. In experiments without forgeries, the average error rates are less than 2%. A universality of the applied space of pattern representations allows us to extend the proposed approach to classifying objects given by color images.

References

[1] *Berretti S., Del Bimbo A.* A Multiresolution Spatial Partitioning for Shape Representation // Proceedings of the ICPR 2004. — P. 775–778.

[2] *Torsello A.* Matching Hierarchical Structures for Shape Recognition // PhD thesis, 2004.

[3] *Ganebnykh S., Lange M.* Classification of 2D Grayscale Objects in a Space of the Multiresolution Representations // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No 4. — P. 591–602.

[4] *Theodoridis S., Koutroumbas K.* Pattern Recognition. — San Diego, USA: Academy Press, 2006. — 837 p.

[5] `www.cs.ust.hk/svc2004` — SVC 2004: International Signature Verification Competition. — 2004.

[6] `vision.auc.dk/~tbm/Gestures/database.html` — Thomas Moeslund's Gesture Database. — 2002.

A two-step procedure for automated registration of visible and x-ray images of fine art paintings*

Murashov D. M.
d_murashov@mail.ru
Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russian Federation

This paper presents a two-step procedure for automated registration of photographs and roentgenograms of fine art paintings. Grayscale local maxima in blurred images are used as the control points. An SVD-based point sets matching algorithm is combined with iterative procedure for excluding false correspondences. General projective transformation model is used for image registration. The precise step of the procedure reduces registration error obtained at the coarse step up to two pixels.

In this paper, a problem concerned to analysis of multispectral images of fine art paintings is considered. Multispectral images are widely used in the research aimed on restoration and attribution of paintings. One of the aspects of such a research is the analysis of information hidden under the visible paint layer [1]. The way to analyze the paintings is to combine images of different modalities in order to localize an object in IR, UV, or X-ray image and its corresponding position in the color image. For the efficient acquisition of information hidden under the visible paint layer, it is necessary to automate operations of image registration, comparison, and analysis of registered images. For this purpose, the computer technologies are widely used [2, 3].The majority of the developed systems provides the automated operations for registration and analysis of IR, UV, and visible images. The properties of X-ray images obstruct the automated registration. The main goal of this work is to automate registration of images taken in visible and X-ray spectral bands (see Fig. 1).

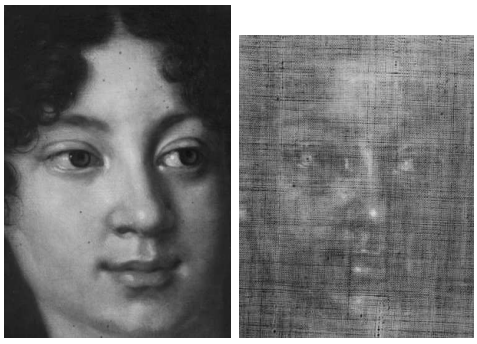


Fig. 1. Images of the painting obtained in optical and in X-ray spectral bands.

The images under research are the JPEG images of size 2800×4200 and of 8 or 24 bpp depth. The size and the viewing fields are different and conditioned by the parameters of X-ray unit and the restorer regions of interest. Visible and X-Ray images differ in size, viewpoint, viewing field, and content. In Fig. 2, the same fragment in color photograph and X-ray image is shown.

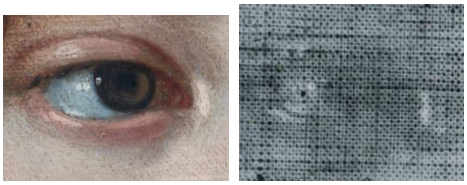


Fig. 2. The same image object in color photograph and in X-ray image.

The considered problem is identical to the conventional problem of image registration, but the listed above properties of X-ray pictures spoil the solution.

The problem can be formulated as follows. Let $u(x, y)\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^1$ be a model image obtained in X-ray spectral band and $v(x, y)\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^1$ be a data image obtained in optical spectral band. It is necessary to find a transform $T\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ minimizing the mean squared error and mapping the data into the model image $X = T(X')$, where $X = (x, y)^T \in \mathbb{R}^2$ and $X' = (x', y')^T \in \mathbb{R}^2$ are the vectors of image coordinates. In the next section conventional approaches to the problem are considered.

Related Works and Solution Scheme

A problem of multimodal image registration in fine arts is analogous to the problems of multimodal medical or aerial image registration. Solution of the problem includes the following four steps [8]: (a) feature detection; (b) feature matching; (c) transform model estimation; (d) image resampling and transformation. The implementation of each registration step meets its specific problems.

The features extracted at the first step are classified with respect to the types of objects detected in the images: region features, line features, and point features. The features should be associated with distinctive objects and should be invariant with respect to selected transform model. If the high-contrast details cannot be find in the image one can use features calculated from information characteristics of images. The features are represented by control points (CP), which are used for calculating parameters of image transform. In [3] the control points are selected man-

This work was supported by the RFBR grant No 09-07-00368.

ually and adjusted by normalized cross-correlation-based algorithm. In automated techniques Harris corner detector is widely used (In [9, 10] and many others). Additional local feature descriptions such as differential geometry invariants [9], moment invariants, scale invariant features (SIFT [11]) [10] can be used. In [12] an algorithm for registration of UV and visible images implements the maximization of the mutual information technique based on maximizing measure of statistical dependency of two images. The maximization process implemented as a heuristic iterative search procedure in the space of four parameters. A variety of feature matching techniques is known. In [9] an algorithm based on differential invariant description and CPs spatial relations defined as the angles between directions to neighbor points is presented. Another technique is named the Iteration closest point registration (ICP) [13]. The algorithm iteratively assigns correspondences utilizing the nearest neighbor criterion to minimize the sum of squared distances between the points of the two sets. The ICP requires a good initial estimate to converge to a global minimum. Another group of feature matching techniques uses the spectral properties of the proximity matrix. The elements of the matrix represent the degree of attraction between image features via a Gaussian-weighted distance metric. In [5] an SVD-based feature matching technique is proposed. The technique can work with point sets of different size but is sensitive to rotation. In [6] an eigenvector approach to the problem of feature matching is presented. Correspondences are established by comparing the ordered eigenvectors of the proximity matrices of different images. This method shows the best results with point sets of the same size. A variety of the spectral-based techniques improving [5] and [6] were developed recently.

The most widely used transformation models describing the geometric deformations specific to image acquisition process are the affine [3, 12] and perspective projection models [4]. In some cases another types of models are studied by the authors.

The analysis of publications has shown that (a) the problem of automated registration of X-ray images of fine art paintings is purely represented in literature; (b) the feature sets commonly used in image registration techniques are ineffective in the current task due to the properties of X-ray images; (c) simple for implementation and efficient SVD-based point matching technique is attractive in the current research; (d) the model of perspective projection is adequate to the problem under consideration.

Here, we propose a two step procedure, oriented on the specificity of the problem. The main operations of the developed procedure are as follows: (a) image preprocessing (color reduction, filtering, downsampling, etc.); (b) control points localization; (c) establishing correspondence of control points sets; (d) calculation of transformation matrix and image registration. To increase the precision of registration, the operations (b)–(d) are running twice at the steps of rough and precise registration.

The localization of control points for registration X-ray and visible images is complicated by difference in image content. The characteristic points found in one of the images may not be found in another image of the pair. Also, it is not easy to find in the images of fine art paintings the geometrical primitives and the local features suitable for image registration. In the roentgenograms of paintings the objects painted using the white lead are strongly discernible and looking bright. The bright regions in the X-ray image are usually corresponding to the bright regions in the photograph (see Fig. 1). This property will be used for selecting the control points. In this work, the local grayscale maxima associated with bright regions of painting will be used as the control points. The local intensity extrema are invariant to translation, rotation, scaling, and global intensity variance. In order to exclude the maxima corresponding to small image details or conditioned by noise, the images should be smoothed. The degree of smoothing should be selected taking into account the value of registration error. We propose a two step registration process. At the coarse step, the strongly smoothed images are used for localizing the control points. In this case, only a few reciprocal points associated with large bright image details will be found. At the precise registration step, the slightly smoothed images are used for the control points detection. This yields that the number of reciprocal points will increase, and the registration error will decrease. At the first step of the procedure an SVD-based algorithm [5] seems to be the most appropriate for finding a correspondence between the control point sets of two images. This algorithm is not invariant to rotation. To overcome this drawback we use distances between the control points as the image features for constructing the proximity matrix. At the second step the control points correspondence is found directly from the analysis of coordinate-based proximity matrix. For eliminating the false correspondences, the special iterative procedure is proposed. The task of obtaining the optimal transform between two images is solved using conventional technique [4]. The next sections are devoted to the main operations of the proposed procedure.

Image Preprocessing

For simplification, all of the image processing operations deal with grayscale images. Hence, the first operation is the color reduction. The canvas texture of X-ray image (see Fig. 1, Fig. 2) obstructs the control points detection. To suppress the periodical intensity oscillations the image filtering is applied:

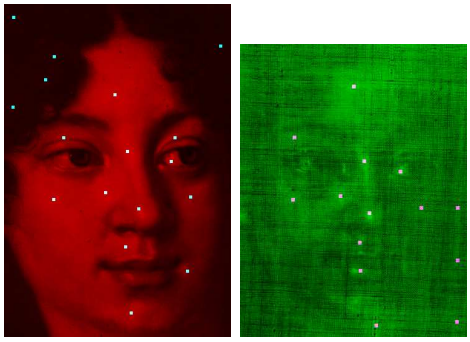


Fig. 3. Local intensity extrema in visual and in X-ray images.

$v_F = \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(v) \cdot I_m)$, where v and v_F are the initial and the filtered images, $\mathcal{F}$ and $\mathcal{F}^{-1}$ are the operations of forward and backward Fourier transform, I_m is the filter mask, $(\cdot)$ denotes the operation of elementwise multiplication.

In order to reduce the computational expenses at the main stages of the procedure, image processing algorithms operates with images of size equal to 1/4 or 1/8 of the initial size. At the final stages the full-size images are utilized. As soon as the control points are associated with the bright image areas, it is reasonable to segment the regions of interest in order to exclude the waste of points. For this purpose the algorithm of adaptive thresholding is used [7].

Image Registration at the Coarse Step

Both at the coarse and the precise steps the local intensity maxima associated with the bright details existing in X-ray and visible images are used as the control points candidates. For reducing the noise remained after filtering and suppressing the influence of small objects and details, the images are blurred by convolution with Gaussian kernel

$$G(x, y, \sigma) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp^{\frac{-(x^2-y^2)}{2\sigma^2}},$$

where x and y are the spacial coordinates, σ is the parameter. The chosen σ value should provide only a few local maxima in one region of interest. Local intensity maxima detected in the images presented in Fig. 1 at $\sigma = 10$ are shown in Fig. 3.

The next operation to be done is to find correspondences between two point sets detected in X-ray and visible images. For this purpose Scott and Longuet-Higgins method [5] based on singular value decomposition of the proximity matrix

$$W(k, l) = \exp\bigl(-d^2(x_k, x_l)/2r^2\bigr)$$

is applied. Here, $d(x_k, x_l)$ is the Euclidian distance from point k in image u to point l in image v, r is the parameter describing the admissible distance. In this work, we apply the following weighting function [10] improving the results:

$$W(k, l) = \exp\bigl(|d(x_k, x_l)|/|r|\bigr). \tag{1}$$

The value $r = 35$ is chosen while tuning. The result of the algorithm is the correspondence matrix. Maximal element in row i and column j shows the correspondence of point i in the first image to point j in the second one. This method is not invariant to rotation. To overcome this drawback we use Euclidean distances between the control points as the image features for constructing the proximity matrix (1). Scott and Longuet-Higgins method is rather simple for implementation, but it can establish false correspondences working with real images. In order to decrease the number of false associations additional local feature descriptions are usually used In case of significant differences in image modalities (see Fig. 2) the local feature descriptions cannot improve the result. For eliminating false CP correspondences the following iterative procedure is proposed. The correspondence is considered as false if the registration error for this CP couple gives the maximal contribution to an error functional. Let the quality of CP registration at iteration i is defined as

$$I_i = \sum_{i=0}^{p-i} d_{ij}^2, \quad d_{ij}^2 = (x_j - x_j^{Ti})^2 + (y_j - y_j^{Ti})^2,$$

where i is an iteration number, j is a point couple number, p is an initial number of CP couples, x_j^{Ti} and y_j^{Ti} are the coordinates of j CP in the data image transformed by a transformation T calculated at step i. The CP couple number k is excluded if the following condition is held:

$$\Delta I_{i,k} = d_{ik}^2 = \max_j(d_{ij}^2), \quad 0 \leqslant k \leqslant p - i.$$

The process is terminated if $\max_j(|d_{ij}|) < d_{\max}$, where $d_{\max}$ is the absolute error bound, or if $I < I_{\max}$, $I_{\max}$ is depending on the mean squared error bound.

The registration quality is evaluated by the absolute error value, mean squared error, and visually.

As it was mentioned above, the suitable transformation for solving the considered problem is the general projective transformation. The problem calculating transformation matrix is formulated as follows [4]. Let $u(x, y)\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^1$ be a model image obtained in X-ray spectral band and $v(x, y)\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^1$ be a data image obtained in optical spectral band. It is necessary to find a transformation matrix H

$$\widetilde{X} = H\widetilde{X}' \tag{2}$$

minimizing the mean squared error and mapping $v(x, y)$ into $u(x, y)$. In (2) $\widetilde{X} = (x, y, 1)^T$ and $\widetilde{X}' = (x', y', 1)$ are the homogeneous coordinates of the

model and the data images, H is a homogeneous 3×3 matrix. For calculating H, it is necessary to solve $2n$ linear algebraic equations for n associated control points. We use Levenberg–Marquardt algorithm providing good convergence.

The Precise Registration Step

At the precise registration step in order to provide suitable precision, the control points are detected in slightly blurred images. At this step for CP association we analyze directly the proximity matrix of two point sets because corresponding maxima in the images registered at the previous step are closely spaced. For association of found intensity maxima points the following operations are needed: (a) the coordinates of the data image maxima are transformed using the matrix H obtained at the coarse step; (b) the proximity matrix of two maxima sets is calculated; (c) maximal elements in rows and columns of the proximity matrix are found. Indices of the found matrix element define the correspondence of an element i of the first point set to an element j of the second set; (d) CP coordinates are scaled to original size, a new transformation matrix H is calculated, and the data image of the original size is transformed. The result of registration of images shown in Fig. 1 is shown in Fig. 4.

Fig. 4. The registered images from Fig. 1.

The developed procedure was tested on ten artificial image pairs and four real image pairs. The mean squared error does not exceed one pixels at the control points for artificial images and two pixels for real images.

Conclusions

The two-step procedure of the automated registration of multimodal images of fine art paintings is developed. Local intensity extrema detected in blurred images are used as the control points. The control points are associated with bright regions in the painting visible in X-ray and optical spectral bands. At the coarse step Scott and Longuet-Higgins algorithm is applied for establishing correspondences between the characteristic point sets. The distances between image CP are used as the features for constructing proximity matrix. The algorithm is combined with iterative procedure for excluding false correspondences. The general projective transformation model is used for image registration. At the precise step the registration precision is increased up to two pixel at the control points. The future research will be aimed on improving point set matching technique.

References

[1] *Kirsh A. and Levenson R. S.* Seeing through paintings: Physical examination in art historical studies. — New Haven, CT, Yale U. Press, 2000.

[2] *Stork D. G.* Computer Vision and Computer Graphics Analysis of Paintings and Drawings: An Introduction to the Literature // LNCS 5702, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg. — 2009. — Pp. 9–24.

[3] *Kammerer P., Hanbury A., Zolda E.* A Visualization Tool for Comparing Paintings and Their Underdrawings // In Proc. of the Conference on Electronic Imaging and the Visual Arts (EVA 2004). — 2004. — Pp. 148–153.

[4] *Hartley R., Zisserman A.* Multiple View Geometry in Computer Vision. — Cambridge University Press, 2004.

[5] *Scott G., Longuet-Higgins H. C.* An Algorithm for Associating the Features of Two Images // In Proc. of the Royal Society London. — 1991. — Vol. B244, — Pp. 21–26.

[6] *Shapiro L., Brady J.* Feature-based correspondence: an eigenvector approach // Image and Vision Computing. — 1992. — Vol. 10, Issue 5, — Pp. 283–288.

[7] *Niblack W.* An Introduction to Digital Image Processing — Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 1986.

[8] *Zitova B., Flusser J.* Image registration methods: a survey // Image and Vision Computing. — 2003. — Vol. 21. No 11. — Pp. 977–1000.

[9] *Schmid C., Mohr R.* Local Greyvalue Invariants for Image Retrieval // PAMI. — 1997. — Vol. 19. No 5, — Pp. 872–877.

[10] *Delponte E., Isgro F., Odone F., Verri A.* SVD-matching using SIFT features // Graphical Models. — 2006. — Vol. 68 No 5. — Pp. 415–431.

[11] *Lowe D. G.* Object recognition from local scale-invariant features // Proceedings of ICCV. — 1999. — Pp. 1150–1157.

[12] *Cappellini V. et.al.* An automatic registration algorithm for cultural heritage images // Proc. of ICIP2005. Genoa, Italy. — 2005. — Vol. 2, — Pp. 566–569.

[13] *Chen Y., Medioni G.* Object Modelling by Registration of Multiple Range Images // International Journal of Computer Vision and Image Understanding. — 1992. — Vol. 10. No 3. — Pp. 145–155.

Функции расстояния для классификации знаковых представлений изображений*

Броневич А. Г., Гончаров А. В.
brone@mail.ru, goncharov@cvisionlab.com
Таганрог, Таганрогский технологический институт Южного федерального университета

Вводится понятие знакового представления изображений. Разрабатываются методы классификации знаковых представлений. Вводятся и исследуются меры близости на знаковых представлениях на основе мер информативности. Проводится сравнение введенных классификаторов на примере задачи детекции лиц.

Distance functions for classification of sign-based image representations*

Bronevich A. G., Goncharov A. V.
Taganrog Institute of Technology of Southern Federal University, Taganrog, Russia

The sign-based image representation is introduced and their classification methods based on distance functions are developed. The distances are introduced through the measures of informativity. Evaluation of introduced classifiers is done by comparing their efectivity for solving face detection problem.

Знаковое представление изображений является новым подходом к построению системы информативных признаков для задач анализа изображений и распознавания образов. Знаковое представление изображений может эффективно применяться для решения задач детекции и идентификации лиц [1], поиска нечетких дубликатов в больших коллекциях изображений [2]. Теоретическое исследование свойств знаковых представлений рассмотрено в [3, 4, 5].

Целью настоящей работы является разработка и исследование различных подходов к классификации знаковых представлений, базирующихся на принципах теории информации. Рассматривается следующая постановка задачи. Пусть имеется некоторая обучающая выборка $X = \{(f_i, n_i)\}_{i=1}^N$, в которой каждому изображению f_i поставлен в соответствие номер класса $n_i \in \{1, \dots, L\}$. По выборке X необходимо построить правило классификации изображений, в соответствии с которым произвольное изображение f можно отнести к одному из классов $\mathrm{Cl}_1, \dots, \mathrm{Cl}_L$ оптимальным в некотором смысле образом.

Определение и примеры знакового представления изображений

Неотрицательную целочисленную функцию $f(\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)$, заданную в узлах сетки $\Omega = I_N \times I_M = \{1, \dots, N\} \times \{1, \dots, M\}$, будем называть изображением. Множество всех изображений $f\colon \Omega \to \mathbb{Z}_+$ обозначим через $\mathcal{F}$.

Определение 1. *Отношение $\tau \subseteq \Omega \times \Omega$ будем называть знаковым представлением изображения $f \in \mathcal{F}$, если выполняются следующие условия:*

1) если $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \tau$, то $f(\boldsymbol{x}) \leqslant f(\boldsymbol{y})$;

2) если $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \tau$, $(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}) \notin \tau$, то $f(\boldsymbol{x}) < f(\boldsymbol{y})$.

В качестве примеров рассмотрим полное и оконное знаковые представления. Знаковое представление будем называть *полным*, если хотя бы одна из пар $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ или $(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x})$ при $\boldsymbol{y} \neq \boldsymbol{x}$ принадлежит τ.

Если отношение τ содержит только пары смежных пикселей в смысле окрестности

$$O_\varepsilon(\boldsymbol{x}) = \{\boldsymbol{y} \in \Omega \mid \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\| \leqslant \varepsilon\},$$

где $\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\| = |x_1 - y_1| + |x_2 - y_2|$, то τ — *оконное* знаковое представление:

$$\tau = \left\{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \Omega^2 \mid f(\boldsymbol{x}) \leqslant f(\boldsymbol{y}), \boldsymbol{y} \in O_\varepsilon(\boldsymbol{x})\right\}.$$

Обозначим через C_τ множество изображений, имеющих знаковое представление τ. Множество C_τ является аналогом понятия формы в морфологии Пытьева [6]. Пусть Φ — семейство отображений $\varphi\colon \mathbb{Z}_+ \to \mathbb{Z}_+$, моделирующих условия регистрации изображения. Тогда под формой в морфологии Пытьева понимается множество изображений $\mathcal{V}_f = \{\varphi \circ f \mid \varphi \in \Phi\}$. Если Φ — класс всех строго возрастающих отображений, то $\mathcal{V}_f \subseteq C_\tau$. Включение $C_\tau \subseteq \mathcal{V}_f$ выполняется только для случая полного знакового представления, и в этом случае понятие формы и понятие знакового представления совпадают. Если же отношение τ не является связным, то множество C_τ шире, чем множество $\mathcal{V}_f$.

Определение 2. *Функцией расстояния на знаковых представлениях будем называть отображение $d\colon \mathcal{F} \times \mathcal{F} \to [0, \infty)$, обладающее тремя свойствами:*

1) $d(f, g) = d(g, f)$ для всех $f, g \in \mathcal{F}$;

2) $d(f_1, f_2) = d(f_1, f_3)$, если $d(f_2, f_3) = 0$ для всех $f_1, f_2, f_3 \in \mathcal{F}$;

3) каждому классу эквивалентности $C_f = \{g \in \mathcal{F}\colon d(f, g) = 0\}$ соответствует некоторое знаковое представление изображения.

Частным случаем функции расстояния является метрика на знаковых представлениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 08-07-00129, № 10-07-00135, № 10-07-00478.

Определение 3. *Метрикой на знаковых представлениях называется функция расстояния* $d\colon \mathcal{F}\times\mathcal{F}\to[0,\infty)$, *обладающая свойством:* $d(f_1,f_2)+d(f_2,f_3)\geqslant d(f_1,f_3)$ *для всех* $f_1,f_2,f_3\in\mathcal{F}$.

Пусть $f_1,f_2\in C_f$ и $g\in\mathcal{F}$, тогда из свойства 2) следует, что $d(f_1,g)=d(f_2,g)$. Таким образом, можно считать, что метрика введена на классах эквивалентности и $d(C_f,C_g)=d(f,g)$ для $f,g\in\mathcal{F}$. Из определения 2 следует, что функция расстояния определяет некоторое разбиение множества $\mathcal{F}$ на непересекающиеся классы, которым соответствуют знаковые представления, и может быть введена не на всех возможных знаковых представлениях, а только на некотором подмножестве знаковых представлений, определяющих разбиение множества $\mathcal{F}$. Выясним, как порождаются такие разбиения. Далее будем рассматривать элементарные знаковые представления, которым соответствуют классы эквивалентности вида $C_{ij0}=\{f\in\mathcal{F}\mid f(\boldsymbol{x}_i)=f(\boldsymbol{x}_j)\}$ и $C_{ij1}=\{f\in\mathcal{F}\mid f(\boldsymbol{x}_i)<f(\boldsymbol{x}_j)\}$ для $i\neq j$. Данные классы соответствуют элементарным отношениям квазипорядка пикселей $\boldsymbol{x}_i$ и $\boldsymbol{x}_j$. Классы C_{ij0}, C_{ij1}, C_{ji1} при $i\neq j$ представляют собой элементарное разбиение множества $\mathcal{F}$, при этом каждый класс $C_\tau=\bigcap_{\substack{(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)\in\tau\\(\boldsymbol{x}_j,\boldsymbol{x}_i)\in\tau}}C_{ij0}\cap\bigcap_{\substack{(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)\in\tau\\(\boldsymbol{x}_j,\boldsymbol{x}_i)\notin\tau}}C_{ij1}$. Элементарное отношение на $(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)$ можно рассматривать в качестве некоторого *признака* $\pi_{ij}^f=\operatorname{sign}(f(\boldsymbol{x}_j)-f(\boldsymbol{x}_i))$.

Как правило, решение о принадлежности изображения некоторому классу принимается по некоторому множеству признаков. С учетом этого будем считать, что задано некоторое множество признаков $\Pi=(\pi_{ij})_{(i,j)\in\alpha}\subseteq\Omega\times\Omega$, которое описывается антисимметричным и антирефлексивным отношением α, и признаки рассчитываются для каждой пары пикселей $(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)$, $(i,j)\in\alpha$. Тогда в качестве разбиения множества $\mathcal{F}$ можно выбирать все непустые подмножества вида: $C(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)=\bigcap_{(i,j)\in\alpha_1}C_{ij0}\cap\bigcap_{(i,j)\in\alpha_2}C_{ij1}\cap\bigcap_{(i,j)\in\alpha_3}C_{ji1}$, где $\alpha_1\cup\alpha_2\cup\alpha_3=\alpha$ и α_k, $k=1,2,3$, — попарно непересекающиеся множества.

Рассмотрим подход к выбору функции расстояния d на знаковых представлениях, основанный на измерении количества информации. Будем считать, что для каждого признака π_{ij}^f можно указать его информативность $w(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)\geqslant 0$. Тогда в качестве значения расстояния между знаковыми представлениями изображений $f,g\in\mathcal{F}$ можно выбрать количество информации, которое мы теряем, предполагая, что знаковые представления изображений f и g являются тождественными.

Пусть $\alpha_{fg}=\{(i,j)\in\alpha\mid\pi_{ij}^f\neq\pi_{ij}^g\}$. В первой предлагаемой модели будем считать, что признаки являются независимыми, тогда $d(f,g)=\sum_{(i,j)\in\alpha_{fg}}w(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)$. Независимость признаков — достаточно сильное предположение, которое не всегда выполняется на практике. Например, для полного знакового представления условие независимости нарушается, так как признаки являются зависимыми в силу транзитивности рассматриваемых отношений. Более общий подход состоит в следующем. Будем считать, что каждому подмножеству признаков $A\subseteq\Pi$ поставлено в соответствие значение информативности $\mu(A)\geqslant 0$, удовлетворяющее аксиомам неаддитивной меры [10]:

а) $\mu(\varnothing)=0$;

б) $\mu(A)\leqslant\mu(B)$, если $A\subseteq B$.

Тогда функцию расстояния можно определить следующим образом:

$$d_\mu(f,g)=\mu(\alpha_{fg}). \tag{1}$$

Следующее утверждение дает нам необходимые и достаточные условия того, что функция d_μ является метрикой на знаковых представлениях.

Утверждение 1. *Функция* d_μ *является метрикой на знаковых представлениях, определяемых системой признаков* $\Pi\subseteq\Omega\times\Omega$, *в том и только том случае, если:*

1) $\mu(A)>0$ *для всех* $A\subseteq\Pi$ *при* $|A|>0$;

2) $\mu(A)+\mu(B)\geqslant\mu(A\cup B)$ *для всех* $A,B\subseteq\Pi$ *при* $A\cap B=\varnothing$.

Условие 1) очевидно необходимо, так как значение функции d_μ должно быть больше нуля, если знаковые представления отличаются друг от друга значением хотя бы одного признака. Неравенство 2) следует из неравенства треугольника.

Условие 2) — это свойство субаддитивности меры информативности, выполнение которого обосновывается многими исследователями в теории информации [8]. В частности, если $\mu(A)+\mu(B)=\mu(A\cup B)$ для всех $A,B\in\alpha$ при $A\cap B=\varnothing$, то мера μ является аддитивной и это соответствует случаю независимости признаков. Если не выполняется условие 1), то найдется такой признак $\pi_{ij}\in\Pi$, что $\mu(\{\pi_{ij}\})=0$. Из условия субаддитивности μ следует, что $\mu\left(A\setminus\{\pi_{ij}\}\right)=\mu(A)$ для любого $A\subseteq\Pi$. С учетом этого, неинформативные признаки можно исключить из рассмотрения, при этом d_μ будет метрикой на знаковых представлениях, порожденных более узкой системой признаков.

В простейшем случае можно считать, что информативность всех признаков одинаковая, т. е. мера информативности $\mu(A)=|A|$ совпадает с мощностью множества A и, очевидно, является аддитивной мерой. В этом случае, метрика (1) представляет собой метрику Хэмминга:

$$d_H(f,g)=|\alpha_{fg}|. \tag{2}$$

При анализе реальных коллекций изображений каждое изображение можно моделировать как ре-

ализацию многомерной случайной величины. Признаки изображений также являются случайными величинами, и для оценки их информативности можно, например, использовать энтропию Шеннона [7, 8], которую обозначим через S. Тогда меру информативности множества признаков $A \subseteq \Pi$ можно определить как энтропию случайного вектора $\left(\pi_{ij}^f\right)_A$: $\mu_S(A) = S\left(\left(\pi_{ij}^f\right)_A\right)$.

Легко проверить, что функция множества μ_S удовлетворяет всем необходимым свойствам, которые вытекают из хорошо известных свойств энтропии, в частности, из субаддитивности энтропии. Кроме того, если признаки $\pi_{ij}^f \in \Pi$ являются независимыми, то $\mu_S(A) = \sum_{\pi_{ij}^f \in A} S\left(\pi_{ij}^f\right)$. Пусть $p_{ijk} = \mathsf{P}\{\pi_{ij} = k\}$ — вероятность того, что признак π_{ij} примет значение $k \in \{-1, 0, 1\}$. Тогда

$$d_S(f,g) = -\sum_{(i,j)\in\alpha_{fg}} \sum_{k\in\{-1,0,1\}} p_{ijk} \log p_{ijk}. \qquad (3)$$

Метрика (3) не учитывает особенности различия между классами. Было бы более предпочтительным присваивать большую информативность признакам при построении метрики d_l, по которым класс Cl_l, $l = 1, \ldots, L$, отличается от других классов. Рассмотрим выбор функции расстояния на основе относительной энтропии. Пусть Ψ — это конечное множество, функции p, $q\colon \Psi \to [0,1]$ описывают вероятностные распределения на Ψ и распределение p абсолютно непрерывно относительно q. Тогда функционал

$$S_{KL}(p,q) = \sum_{x\in\Psi} p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)}$$

называется энтропией[1] распределения p относительно распределения q.

Пусть случайная величина $\pi_{ij}^{f|\mathrm{Cl}_l}$ описывает наблюдение признака π_{ij}^f для изображения $f \in \mathrm{Cl}_l$. Тогда информативность множества признаков $A \subseteq \Pi$, позволяющую учитывать различия распределения признаков в классах можно оценить с помощью функционалов

$$\mu_{F,G}(A) = S_{KL}\left(\left\{\pi_{ij}^{f|F}\right\}_A, \left\{\pi_{ij}^{f|G}\right\}_A\right), \qquad (4)$$

где F и G — один из классов Cl_l, $\overline{\mathrm{Cl}}_l = \bigcup_{m|m\neq l} \mathrm{Cl}_m$ и $\mathrm{Cl} = \bigcup_l \mathrm{Cl}_l$. Функции расстояния, построенные по неаддитивным мерам $\mu_{\mathrm{Cl}_l,\overline{\mathrm{Cl}}_l}$ и $\mu_{\overline{\mathrm{Cl}}_l,\mathrm{Cl}_l}$ являются наиболее чувствительными к различиям между классами. Функция расстояния, построенная по мере $\mu_{\mathrm{Cl}_l,\mathrm{Cl}}$, по-видимому, должна обладать более регулярными свойствами. В частности, вероятностное распределение признаков класса Cl_l всегда абсолютно непрерывно относительно вероятностного распределения признаков класса Cl, $\mu_{\mathrm{Cl}_l,\mathrm{Cl}}$ всегда конечные. Классификация по функции расстояния, основанной на неаддитивной мере $\mu_{\mathrm{Cl},\mathrm{Cl}_l}$, близка к байесовской классификации.

Функции расстояния, построенные по мерам (4) не являются метриками в общем случае, поскольку введенные неаддитивные меры скорее супераддитивные, чем субаддитивные. Если признаки в обоих классах F и G являются независимыми, то $\mu_{F,G}$ является аддитивной мерой на подмножествах Π. Тогда

$$d_{F,G}(f,g) = \sum_{(i,j)\in\alpha_{fg}} \mu_{F,G}\left(\{\pi_{ij}\}\right). \qquad (5)$$

В данном случае $d_{F,G}$ является метрикой на знаковых представлениях.

Классификация знаковых представлений на основе функций расстояния

Рассмотрим классификацию знаковых представлений на основе функций расстояния. Для классов Cl_l, $l = 1, \ldots, L$, необходимо определить эталонные знаковые представления $\mathcal{E}_l$, а также функции расстояния d_l. Тогда правило классификации задается условием: $f \in \mathrm{Cl}_m$, если $d_m(f, \mathcal{E}_m) + \varepsilon_m = \min_l(d_l(f, \mathcal{E}_l) + \varepsilon_l)$. Числовые параметры ε_l позволяют регулировать ошибки первого и второго рода. Эталонные наборы признаков $\mathcal{E}_l = \left(\pi_{ij}^l\right)_\Pi$ можно выбрать, например, как наиболее вероятные значения признаков, оцененные по обучающей выборке X: $\pi_{ij}^l = \arg\max_c \hat{\mathsf{P}}\left\{\pi_{ij}^l = c \mid \mathrm{Cl}_l\right\}$.

Рассмотрим задачу классификации знаковых представлений на два класса, и проанализируем, как зависят ошибки классификации первого и второго рода от используемых функций расстояния.

Пусть $\mathcal{E}_0$ — эталонный образ класса Cl_0, при этом изображение f относится к классу Cl_0, если $d_\mu(f, \mathcal{E}_0) < d_0$, в противном случае изображение f относится к альтернативному классу Cl_1. Поскольку на классификацию поступают случайные изображения, значение функции расстояния $\xi = d_\mu(f, \mathcal{E}_0)$ можно считать случайной величиной. Оценка вероятностного распределения случайной величины ξ в общем виде затруднительна. Тем не менее, можно предположить, что она распределена по нормальному закону, поскольку ее значение формируется как сумма большого количества случайных величин (см. (2)–(5)).

Для оценки разделяющей способности введенных функций расстояния проведем статистическую оценку ошибок классификации первого и второго рода для задачи детекции лиц по обучающей выборке[2] $X = X_F \cup X_N$, $X_F \cap X_N = \varnothing$, где X_F — выборка изображений лиц, а X_N — выборка произвольных изображений, не содержащих

[1] В литературе относительную энтропию также называют расстоянием или дивергенцией Кульбака–Лейблера [7, 9].

[2] CBCL Face Database #1, MIT Center For Biological and Computation Learning, http://www.ai.mit.edu/projects/cbcl

лица. Таким образом, необходимо найти оценки вероятностей $e_1 = \mathsf{P}\{d_\mu(f, \mathcal{E}_0) < d_0 | f \in \mathrm{Cl}_1\}$ и $e_2 = \mathsf{P}\{d_\mu(f, \mathcal{E}_0) \geqslant d_0 | f \in \mathrm{Cl}_0\}$ по выборке X.

Для оценки вероятностей e_1 и e_2 оценим функцию плотности распределения случайной величины ξ используя для этого параметрический и непараметрический подходы. На рис. 1 представлены результаты статистической оценки распределения случайной величины ξ, полученные для изображений лиц (метка «F») и изображений не лиц (метка «N») и функций расстояния (2), (3) и (5).

На рис. 2 представлены результаты оценок ошибок e_1 и e_2. На рис. 3 представлены эталонный образ и карты значений меры информативности признаков. Визуально обе меры информативности достаточно близки, но вариация относительной энтропии на порядок выше. Также видно, что наиболее информативными участками лица являются область вокруг глаз и скулы, что согласуется с интуитивным представлением.

Выводы

Предложен общий подход к построению функций расстояния на знаковых представлениях, основанный на измерении информативности признаков. Из результатов численных экспериментов следует, что наименьшие ошибки классификации соответствуют функции расстояния на основе относительной энтропии (5), далее идет метрика на основе энтропии Шеннона (3), затем метрика Хэмминга (2). Это вполне ожидаемый результат, поскольку в (5) учитывается распределение вероятностей как для одного класса, так и для другого, в то время как в (3) учитывается лишь распределение вероятностей для одного класса. Предложенный подход к построению функций расстояния может быть расширен и на другие системы информативных признаков.

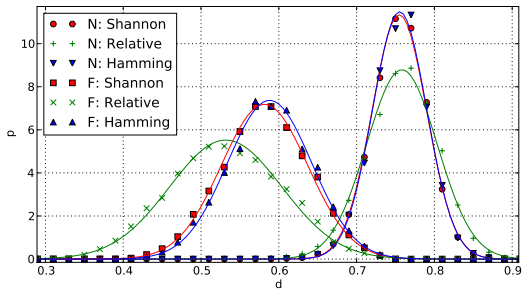


Рис. 1. Статистическая оценка распределения расстояния между шаблоном лица и изображением. Маркеры соответствуют непараметрическим оценкам гистограмм. Линиями отображены параметрические оценки плотностей нормального распределения.

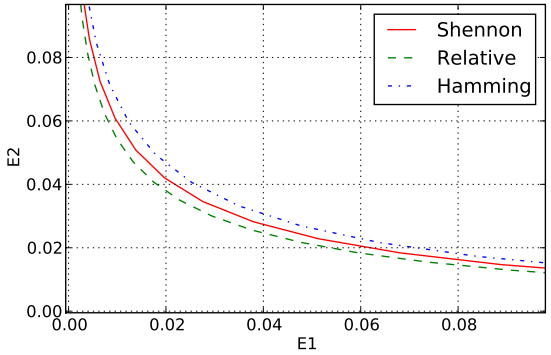


Рис. 2. Оценки ошибок первого и второго рода.

а) б) в)

Рис. 3. а) эталонный образ; б) и в) нормированные изображения значений информативности признаков знакового представления для б) Шенноновской энтропии и для в) относительной энтропии.

Литература

[1] *Гончаров А. В., Горбань А. С., Каркищенко А. Н, Лепский А. Е.* Поиск портретных изображений по содержанию // Интернет-математика 2007: Сб. работ участников конкурса. — 2007. — С. 56–64.

[2] *Goncharov A., Melnichenko A.* Pseudometric Approach to Content Based Image Retrieval and Near Duplicates Detection // Российский семинар по Оценке Методов Информационного Поиска. Труды РОМИП 2007–2008 — С. 120–134.

[3] *Броневич А. Г., Гончаров А. В.* Знаковое представление изображений и его информативность // Всеросс. конф. ММРО-14, Суздаль, 2009. — С. 309–312.

[4] *Броневич А. Г., Гончаров А. В.* Аксиоматический подход к измерению информативности знаковых представлений изображений // Известия РАН. Теория и системы управления. — 2010., №6. (в печати).

[5] *Каркищенко А. Н., Гончаров А. В.* Исследование устойчивости знакового представления изображений // Автом. и телемех. — 2010. №9. С. 57–69.

[6] *Пытьев Ю.П.* Морфологический анализ изображений // Докл. АН СССР. — 1983. — Т. 296, №5. — С. 1061–1064.

[7] *Duda R. O., Hart P. E, Stork D. G.* Pattern classification. — Wiley-Interscience, 2001.

[8] *Klir G. J.* Uncertainty and Information. Foundations of Generalized Information Theory. — Wiley-Interscience, 2006.

[9] *Escolano E. ,Suau P., Bonev B,* Information Theory in Computer Vision and Pattern Recognition. — Springer Verlag, 2009.

[10] *Denneberg D.* Non-additive measure and integral. — Springer, 1994.

Обнаружение информативных фрагментов в задаче оценки качества изображений*

Гашников М. В., Мясников В. В.
mgash@smr.ru
Самара, ИСОИ РАН

Разработаны алгоритмы обнаружения на изображениях информативных фрагментов — фрагментов, обладающих специфическими свойствами. Свойства обнаруженных фрагментов позволяет использовать их для оценки искажений обрабатываемого изображения и, как следствие, его качества.

Informative fragments detection in the problem of digital images quality estimation*

Gashnikov M. V., Myasnikov V. V.
IPSI RAS, Samara, Russia

Algorithms for detecting informative image fragments are developed. Due to their specific properties these fragments can be used for estimation of image distortions and image quality.

Постановка задачи оценки качества цифровых изображений актуальна в различных прикладных областях. Решение этой задачи позволяет ответить на важный практический вопрос: может ли конкретная прикладная задача быть решена с использованием предоставленных изображений, и какова при этом будет точность ее решения?

Существуют различные подходы к оценке качества изображения [1–4]. При этом в настоящий момент опубликовано множество [5–9] алгоритмов оценки качества, которые можно условно разделить на две большие группы. Алгоритмы первой группы, например [7–9], слишком узкоспециализированы, т. е. ориентированы на конкретные прикладные задачи.

Алгоритмы второй группы, например [5–6], являются достаточно общими, но при этом основаны на вычислении глобальных характеристик изображений, численно описывающих их визуальное восприятие. В результате показатели, вычисляемые такими агоритмами, оказываются не связаны с показателями качества автоматического решения прикладных задач типа обнаружения, распознавания, анализа, понимания и т.п. Другими словами, несмотря на большое количество существующих подходов и алгоритмов, рассматриваемая задача по прежнему актуальна.

Одним из наиболее конструктивных подходов к оценке качества изображений представляется подход, в котором качество определяется как степень искажения анализируемого изображения. В наиболее важном практическом случае, когда для анализа доступно только «полученное» изображение, говорят о «слепой» идентификации искажающей системы [2–4].

Данная работа основана на одном из наиболее часто используемых на практике способов «слепой» идентификации искажающей системы — методе идентификации искажающей системы «по границам» [3]. Метод состоит из двух этапов. На первом пользователь в интерактивном режиме указывает на изображении фрагменты, специфические свойства которых позволяют использовать их для оценки искажающей системы. На втором этапе метода (обычно автоматически) производится собственно оценка качества обрабатываемого изображения. В роли ключевых показателей качества выступают составляющие линейной искажающей системы и их производная характеристика — величина линейного разрешения цифрового изображения. Данный метод с успехом используется на практике (в геодезии, геоинформатике и др).

Ключевым недостатком метода является необходимость человеческого участия. В рамках настоящей работы предлагаются алгоритмы, позволяющие автоматизировать процесс обнаружения информативных фрагментов, и тем самым полностью автоматизировать весь процесс оценки качества цифрового изображения.

Работа построена следующим образом. Сначала приводится краткое описание известного «слепого» метода оценки искажающей системы «по границам», приводятся основные неформализованные требования к информативным фрагментам изображения. Затем предлагается формализация требований к фрагментам изображения, даётся обоснование этих требований с точки зрения оценки качества изображения «по границам», приводится окончательный вид алгоритма обнаружения информативных фрагментов. Сообщаются результаты исследований и даются примеры использования раз-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-01-00434-а, а также программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Фундаментальные проблемы информатики и информационных технологий», проект 2.12.

работанных алгоритмов для оценки качества реальных цифровых изображений.

Метод оценки искажающей системы «по границам»

На первом этапе метода необходимо указать (обычно это делает пользователь) множества фрагментов изображений двух типов. Первый тип фрагментов — *однородные* (квазипостоянные). Под однородным фрагментом понимается «почти постоянная» прямоугольная область изображения (участок водной поверхности, сельскохозяйственного поля и т.п.).

Второй тип фрагментов — *ступенчатые*. Прямоугольный ступенчатый фрагмент начинается на одной однородной области, заканчивается на другой и делится границей этих областей примерно пополам. Примерами являются переходы типа «земля–вода», «земля–здание» и т. п.

На втором этапе метода производится собственно оценка искажающей системы. Оценка дисперсии шума вычисляется как усредненная выборочная дисперсия по однородным фрагментам. По «ступенчатым» фрагментам производится оценка амплитудно-частотной характеристики (АЧХ) искажающей системы. Оценка строится исходя из известного соотношения (теорема «о центральном сечении» [10]), справедливого для искаженной функции яркости типа «единичный скачок»:

$$H\big(\Omega\cos(\varphi),\Omega\sin(\varphi)\big) = L(\Omega), \quad i = 0,\ldots,N-1,$$

где $H(\cdot,\cdot)$ — собственно АЧХ искажающей системы, φ — угол ориентации ступенчатого фрагмента, $L(\cdot)$ — спектр производной функции яркости вдоль осевого сечения ступенчатого фрагмента.

Для известных АЧХ искажающей системы и дисперсии шума D строится оценка показателя линейного разрешения [3]

$$l = \frac{\pi}{\Omega^*}, \quad \Omega^* : H(\Omega^*,0) = \frac{KT\Omega^*\sqrt{D}}{\sqrt{5}A}.$$

где A — амплитуда функции яркости изображения, $K = 2,\ldots,5$ — параметр, характеризующий субъективный уровень различения мелких деталей.

Недостатком метода является необходимость человеческого участия для указания информативных фрагментов. Ниже представлены формальные требования к информативным фрагментам и собственно алгоритмы их обнаружения в автоматическом режиме.

Формальный критерий однородности фрагмента

Предполагая нормальность дисперсии яркости на фрагменте, можно с доверительной вероятностью p записать доверительный интервал для этой дисперсии:

$$\Delta D = \left(\frac{nD}{\chi^2_{(1+p)/2,n-1}}, \frac{nD}{\chi^2_{(1-p)/2,n-1}}\right),$$

где n — количество отсчетов фрагмента, D — выборочная оценка дисперсии, $\chi^2_{p,n}$ — соответствующие квантили распределения хи-квадрат.

Для расчета «расстояния» между законами распределения яркости на фрагментах будем использовать расстояние Бхаттачария [11]:

$$\rho = \frac{1}{2}\frac{(E_1-E_2)^2}{D_1+D_2} + \frac{1}{2}\ln\frac{D_1+D_2}{\sqrt{D_1D_2}},$$

где E_i, D_i — выборочные оценки среднего и дисперсии для яркости на первом и втором фрагментах.

В данной работе предлагается следующий критерий однородности фрагмента:

1) доверительные интервалы дисперсий яркости D для всех подобластей, полностью лежащих внутри фрагмента, должны пересекаться между собой и пересекать доверительный интервал дисперсии яркости для фрагмента;
2) расстояния ρ между законами распределения яркости для всех подобластей, полностью лежащих внутри фрагмента, должны быть меньше порога;
3) дисперсия яркости на фрагменте должна быть мала.

Нетрудно видеть, что идея этого критерия основана на естественном требовании: все подобласти внутри однородного фрагмента также должны быть однородны.

Формальный критерий ступенчатости фрагмента

Ступенчатый фрагмент (рис. 1) — это прямоугольник с заранее выбранным соотношением сторон (в данной работе 1 к 3). Длинная сторона фрагмента перпендикулярна перепаду яркости и делится им пополам. Прямоугольник состоит из трех подобластей: двух относительно «больших» однородных прямоугольных подобластей одинакового размера по краям фрагмента и одной «малой» прямоугольной подобласти посередине, содержащей собственно перепад яркости. Пусть функция яркости внутри краевых однородных подобластей аппроксимирована константами a и b, а внутри срединной подобласти перепада яркости — полиномом третьего порядка, и пусть ε — суммарная погрешность этой аппроксимации.

В данной работе предлагается следующий критерий ступенчатости фрагмента:

1) соотношение размеров подобластей обрамляющего прямоугольника должно быть в заданных пределах;

2) величина перепада яркости $|a-b|$ должна быть больше порога;
3) однородные подобласти должны удовлетворять критерию однородности (см. п. 2);
4) погрешность ε аппроксимации яркости на фрагменте должна быть достаточно мала;
5) линия перепада функции яркости на фрагменте должна быть прямолинейна: дисперсия углов вектора градиента вдоль перепада яркости (см. рис. 1) должна быть мала.

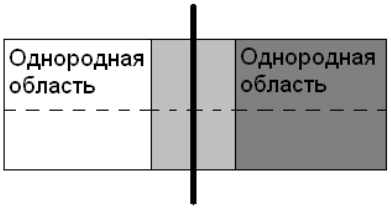


Рис. 1. Ступенчатый фрагмент

Алгоритм обнаружения однородных фрагментов

Алгоритм реализует известный подход «зрение на основе модели» [11], где каждое проверяемое требование — это тестируемая гипотеза.

Шаг 1. Поиск возможных центров фрагментов: на изображении находятся минимумы локальной дисперсии функции яркости.

Шаг 2. Для каждого возможного центра производится перебор размеров фрагмента. Наибольший по размеру фрагмент, удовлетворяющий критерию однородности из п. 2, включается в список.

Шаг 3. Сокращение списка: оставляется заданное количество фрагментов с наименьшими дисперсиями.

Алгоритм обнаружения ступенчатых фрагментов

Пусть требуется найти N ступенчатых фрагментов. При выполнении поиска заполняется список, в каждый момент содержащий не более чем $2N$ непересекающихся фрагментов в порядке возрастания погрешностей ε (см. п. 3) их аппроксимации (при вставке «лишние» фрагменты «вытесняются» из списка, тем самым выполняется требование 4 из п. 3). Соответственно, в каждый момент известна величина $\varepsilon_{\max}$ — максимальная погрешность аппроксимации в этом списке. Алгоритм включает следующие шаги:

Шаг 1. Поиск возможных центров фрагментов: на изображении ищется заданное количество минимумов дискретной разности по каждому направлению (с некоторым шагом $\Delta\varphi$).

Шаг 2. Для каждого возможного центра производится перебор размеров фрагмента и его подобластей. Наибольший по размеру фрагмент, удовлетворяющий требованиям 1–3 из п. 3 и имеющий погрешность аппроксимации меньше чем $\varepsilon_{\max}$, включается в список фрагментов.

В результате выполнения шагов 1–2 найдено $2N$ фрагментов, угол ориентации которых определен недостаточно точно — с погрешностью $\frac{1}{2}\Delta\varphi$ (см. шаг 1). Для уточнения угла для каждого фрагмента из списка выполняется шаг 3.

Шаг 3. Вычисление множества точек, лежащих внутри подобласти перепада яркости фрагмента и являющихся максимумами локального градиента. Вычисление угла наклона главного собственного вектора ковариационный матрицы B координат этот множества точек, который и является уточненным углом ориентации ступеньки:

$$\varphi = \arctan \frac{2B_{01}}{(B_{11}-B_{00}) + \sqrt{(B_{11}-B_{00})^2 + 4B_{10}^2}}.$$

Затем, для выполнения требования 5 из п. 3, выполняется шаг 4:

Шаг 4. В списке оставляется ровно N ступенек, наилучших по критерию минимума дисперсии углов локального градиента вдоль линии перепада яркости.

Результаты

Для оценки качества работы предлагаемых алгоритмов были проведены вычислительные эксперименты на модельных (мозаичного типа) и реальных изображениях. Примеры обнаруженных информативных фрагментов показаны на рис. 2. Видно, что алгоритмы действительно позволяют эффективно находить однородные и ступенчатые области. Экспериментальные оценки скорости работы алгоритмов (с непринципиальными модификациями, направленными на уменьшение количества перебираемых вариантов): 18 сек. при поиске постоянных и 28 сек. при поиске ступенчатых областей на изображении размера 6000×6000 пикселов при использовании среды .NET процессора 2,5 GHz.

Горизонтальные сечения оценок АЧХ $H(\omega)$, где ω — безразмерная частота, полученные с использованием обнаруженных фрагментов, показаны на рис. 3. На модельном изображении вид оцениваемой функции определен правильно (для реального изображения истинная АЧХ не показана, т. к. неизвестна). Кроме того, экспериментально была подтверждена среднеквадратическая сходимость оценки к истинной АЧХ при увеличении количества информативных фрагментов (численные результаты будут представлены в докладе).

Выводы

Разработанные алгоритмы обнаружения информативных фрагментов работоспособны как на модельных, так и на реальных изображениях.

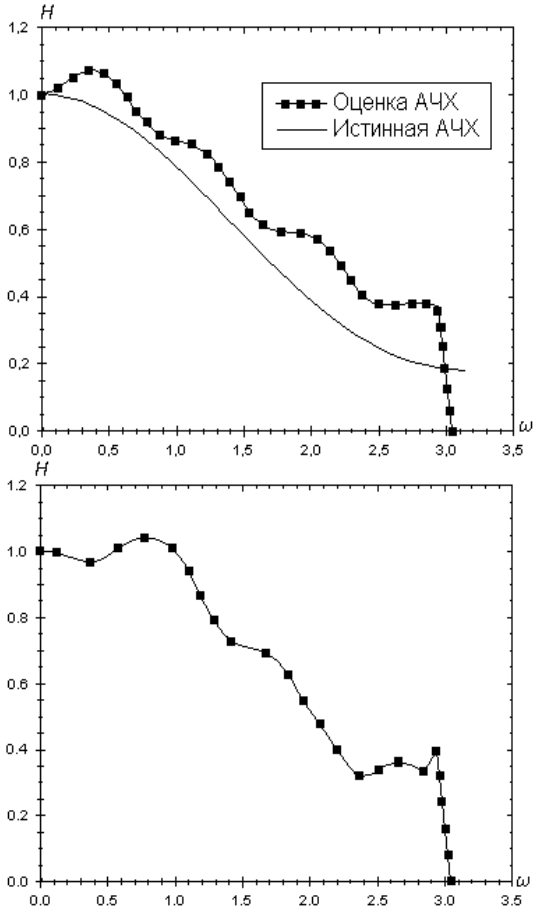


Рис. 3. Примеры результатов оценки АЧХ на модельном и реальном изображениях.

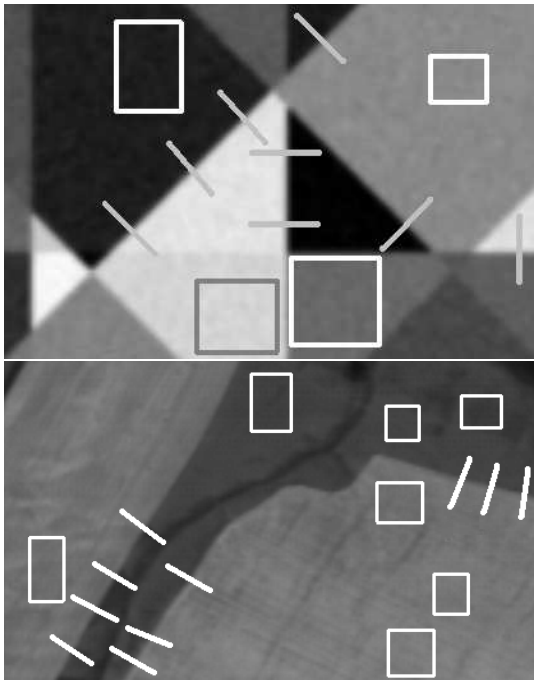


Рис. 2. Примеры результатов обнаружения однородных (прямоугольники) и ступенчатых (отрезки) фрагментов на модельном и реальном изображениях.

Использование этих алгоритмов позволяет построить полностью автоматическую систему оценки качества цифровых изображений, решающую задачи оценки шума, АЧХ и разрешения искажающей системы.

Литература

[1] *Цыпкин Я. З.* Основы информационной теории идентификации. — М.: Наука, 1984. — 320 с.

[2] *Бакалов В. П., Мартюшев В. А., Русских Н. П.* Цифровой алгоритм восстановления пространственно-ограниченного сигнала по свертке с неизвестной искажающей функцией // Автометрия. — 1988. — № 1. — С. 101–103.

[3] *Бейтс Р., Мак-Доннелл М.* Восстановление и реконструкция изображений. — М.: Мир, 1989. — 336 с.

[4] *Василенко Г. И., Тараторин А. М.* Восстановление изображений. — М.: Радио и связь, 1986. — 304 с.

[5] *Wang Z., Bovik A.* A universal image quality index // IEEE Signal Processing Letters. — 2002. — Т. 9, № 2. — С. 81–84.

[6] *Avcivas I., Sankur B., Sayood K.* Statistical evaluation of image quality measures // Journal of Electronic Imaging. — 2002. — Т. 11, № 2. — С. 206–223.

[7] *Wang Z., Sheikh H. R., Bovik A. C.* No-reference perceptual quality assessment of JPEG compressed images // IEEE Int. Conf. on Image Processing, Rochester, NY, September 22-25, 2002

[8] *Carnec M., Le Callet P., Barba D.* An image quality assessment method based on perception of structural information // Int. Conf. on Image Processing, Barcelona, Spain, September 14-17, 2003

[9] *Ong E. P., Lin W., Lu, Yang Z., Yao S., Pan F., Jiang L., Moschetti F.* A no-reference quality metric for measuring image blur // 7th Int. Symposium on Signal Processing and Its Applications, Paris, France, July 1-4, 2003

[10] *Хермен Г.* Основы реконструктивной томографии. Восстановление изображений по проекциям. — М.: Мир, 1983.

[11] *Forsyth D. A., Ponce J.* Computer Vision: A Modern Approach. — Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2003. — 693 с.

Пространство формализации изображений*

Гуревич И. Б., Яшина В. В.
igourevi@ccas.ru, werayashina@gmail.com
Москва, Учреждение Российской академии наук Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН

Работа посвящена формализации и систематизации методов и форм представления информации в задачах анализа, распознавания и понимания изображений. Предложенный подход, основанный на введении пространства формализации изображений, и результаты характеризации последнего имеют принципиальное значение для развития Дескриптивного подхода к анализу изображений. Основной результат — концепция пространства формализации изображений. Приведены аксиомы, определяющие его свойства и структуру. Введенная система понятий составляет основу для стандартизации методов синтеза моделей изображений, ориентированных на задачи анализа и распознавания изображений.

Image formalization space*

Gurevich I. B., Yashina V. V.
Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russian Federation

The paper is devoted to formalization and systematization of techniques and forms of image representations in image analysis, recognition and understanding problems. The new approach based on concept of Image Formalization Space and its characterization are on principle important for development of the Descriptive Approach to Image Analysis. The main contribution is the Image Formalization Space. There are introduced axioms defining its properties and structure. The introduced concept system constitutes a base for unification of image models construction in image analysis and recognition problems.

Введение

Работа посвящена формализации и систематизации методов и форм представления информации в задачах анализа, распознавания и понимания изображений. Предложенный подход, основанный на введении пространства формализации изображений, и результаты характеризации последнего имеют принципиальное значение для развития Дескриптивного подхода к анализу и пониманию изображений И. Б. Гуревича (ДПАИ) [2–4], являющегося специализацией Алгебраического подхода Ю. И. Журавлева [1] на случай представления исходной информации в виде изображений.

Основные результаты:

1) концептуализация системы понятий, характеризующих исходную информацию — изображения — в задачах распознавания;
2) определение дескриптивных моделей изображений (ДМИ), ориентированных на задачи распознавания;
3) определение и характеризация пространства формализации изображений (ПФИ), элементами которого являются различные формы (состояния, фазы) представления изображения, трансформируемого из исходной в «распознаваемую форму», т. е. в модель изображения.

Основной целью ДПАИ является структурирование и стандартизация методов, операций и представлений, используемых в анализе и распознавании изображений. Аксиоматика и формальные конструкции ДПАИ составляют основу методов и инструментов представления и описания изображений для их анализа и оценивания.

В настоящее время критическими путями развития ДПАИ и соответственно математической теории анализа изображений являются:

1) понимание информационной природы изображений;
2) математический язык для единообразного описания моделей изображений и их преобразований, обеспечивающих построение ДМИ и решение задач распознавания;
3) методы представления и описания изображений, обеспечивающие построение ДМИ, ориентированных на задачи распознавания;
4) модели решения задач распознавания в виде стандартных алгоритмических схем, обеспечивающих в общем случае переход от исходного изображения к ДМИ и от ДМИ к искомому решению.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, (гранты №08-01-00469, №10-01-90013), программы ОМН РАН «Алгебраические и комбинаторные методы математической кибернетики и информационные системы нового поколения» (грант «Алгоритмические схемы дескриптивного анализа изображений»), программы фундаментальных исследований Президиума РАН №2 «Интеллектуальные информационные технологии, математическое моделирование, системный анализ и автоматизация» (проект 204 «Представление информации и знаний в анализе изображений»), Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (проект 9009 «Разработка и экспериментальное исследование информационных технологий анализа изображений и распознавания образов, ориентированных на задачи медицинской диагностики»).

ДПАИ задает единую концептуальную структуру для развития и реализации этих моделей и математического языка.

Работа включает два раздела. Первый раздел посвящен основным определениям и структуре вводимого фазового пространства — пространства формализации изображений (ПФИ), позволяющего представлять и описывать процессы трансформации изображения из исходного состояния в ДМИ, допускающие алгоритмы распознавания. Второй раздел содержит сформулированные к настоящему времени аксиомы ДПАИ.

Элементы и структура пространства формализации изображений

При определении системы понятий ДПАИ основополагающими являлись следующие свойства изображений:

1) изображение состоит из множества точек и множества значений, связанных с этими точками;
2) преобразование изображений с целью их анализа включает операции над изображениями и над различными значениями и характеристиками, связанными с этими изображениями;
3) изображение характеризуется двумя типами информации, т. е. задается с помощью пространственных отношений между точками и некоторыми типами числовой или какой-либо другой дескриптивной информации, связанной с этими точками;
4) множество точек является топологическим пространством (оно состоит из объектов, называемых точками, и топологии, которая определяет близость двух точек, связанность подмножества множества точек, соседство точек, наличие граничных точек, кривых и дуг).

Изображение представляет собой смесь исходных (необработанных, «реальных») данных, их реализаций и некоторых деформаций. Реализации (как и соответствующие описания) при этом отражают информационную и физическую природу объектов, событий и процессов, воспроизводимых с помощью изображения, а деформации порождаются техническими характеристиками средств, с помощью которых изображение зарегистрировано, сформировано и преобразовано в процессе построения иерархии описаний.

Определение 1. *Исходным изображением $\mathfrak{I}$ в задачах распознавания изображений называется упорядоченный некоторым образом набор зарегистрированных начальных пространственных и контекстных данных, отражающий вид (форму и состояние) объектов, событий и процессов отображенной сцены и допускающий возможность применения к нему алгоритмов распознавания изображений и интерпретации результатов.*

Определение 2. *Реализация I' изображения $\mathfrak{I}$ — это множество $I' = \{(x, f(x))\}_{x \in D_f}$ точек x, принадлежащих области определения D_f реализации изображения I', и множество значений $f(x)$ в каждой точке D_f .*

Утверждение 1. *Множество реализаций изображения $\mathfrak{I}$ образует топологическое пространство реализаций изображения.*

Доказательство. Будем задавать топологию T множества $\mathfrak{I}$ путем определения ее базы

$$B = \left\{ \left\{ (x, f(x))_{x \in D_f},\ f(x) \in F \right\}_F \right\}_{D_f},$$

где множества базы являются подмножествами множества $\mathfrak{I}$, имеющими общую область определения D_f с различными множествами значений F. Любое открытое множество из топологии T будет задаваться как объединение множеств базы $B \subset T$. Тогда:

1) объединение произвольного семейства множеств, принадлежащих T, принадлежит T;
2) пересечение конечного семейства множеств, принадлежащих T, принадлежит T;
3) $\varnothing$, $\mathfrak{I}$ принадлежит T.

Построенная таким образом топология удовлетворяет всем свойствам топологии. Множество $\mathfrak{I}$ вместе с заданной топологией T по определению является топологическим пространством. ■

Не ограничивая общности, будем считать, что множества значений F являются подмножествами множества действительных чисел $\mathbb{R}$, а область определения изображения является плоскостью действительных чисел $D_f = \mathbb{R} \times \mathbb{R}$. При записи алгоритмической схемы решения задачи распознавания изображений любое множество базы введенной выше топологии задается базовой ДАИ из класса ДАИ над реализациями изображений.

Введем следующие обозначения: $\{I_0\}$ — множество всей возможной исходной информации об изображении; $\{I'\}$ — множество всех цифровых реализаций изображения; $\{B\}$ — множество дополнительной информации об изображении (множество контекстной и семантической информации, связанной со способами получения и формирования изображения и/или отражающей какие-либо его специфические аспекты).

Лемма 2. *Исходное изображение $\mathfrak{I}$ задается множеством исходной информации $\{\hat{I}_0\} \subseteq \{I_0\}$, являющимся прямой суммой двух подмножеств $\{\hat{I}'\} \subseteq \{I'\}$ и $\{\widehat{B}'\} \subseteq \{B\}$:*

$$\{\hat{I}_0\} \equiv \{\hat{I}\} \oplus \{\widehat{B}\} .$$

Доказательство данного утверждения строится от противного с учетом определения 1.

ДПАИ обеспечивает возможность решать как задачи, связанные с построением формальных описаний изображений в качестве объектов распознавания, так и задачи синтеза процедур распознавания и понимания изображений. Процессы анализа и оценивания информации, представленной в виде изображений, рассматриваются как некоторые последовательности/комбинации преобразований и вычисления некоторого набора промежуточных и финальных (определяющих решение) оценок. Эти оценки являются существенными характеристиками представлений исходного изображения, получаемых на каждом этапе приведения изображения к виду удобному для распознавания (ПВУР). Финальные оценки используются на завершающем этапе решения задачи распознавания/классификации исходного изображения при применении алгоритмов распознавания/классификации к построенной в процессе преобразования ДМИ.

Лемма 3. *Процесс построения модели изображения заключается в применении к исходному изображению некоторой системы преобразований, обеспечивающих последовательную смену «состояний» преобразуемого изображения, соответствующих степени его текущей «формализации».*

Доказательство данного утверждения следует из определений 3–5 (см. ниже).

Обозначим множество всех допустимых для данного типа изображения $\mathfrak{I}$ преобразований как $\{O\}$. Для построения «формализованных» описаний изображений преобразования $\{\widehat{O}\} \subseteq \{O\}$ применяются к $\{\hat{I}'\} \subseteq \{I'\}$, с учетом всей доступной информации об изображении $\{\hat{I}_0\} \subseteq \{I_0\}$.

Определение 3. *Дескриптивная алгебраическая схема представления изображения (ДАСПИ)* $\mathfrak{R}$ *— формальная схема, предназначенная для получения стандартизированного формального описания поверхностей, точечных конфигураций, форм, образующих* $\mathfrak{I}$*, и отношений между ними, и записанная с помощью ДАИ.*

ДАСПИ отражают способы последовательного или/и параллельного применения преобразований из множества преобразований к начальной информации из пространства начальных данных. В работе [5] приведен пример построения ДАСПИ для решения задачи морфологического анализа клеток крови. Все шаги алгоритмической схемы обучения алгоритмов распознавания для задачи анализа цитологических препаратов и классификации нового изображения по трем диагнозам с помощью распознающего алгоритма с настроенными параметрами были записаны с помощью специальных ДАИ с одним кольцом.

Обозначим множество всех возможных для данного изображения $\mathfrak{I}$ ДАСПИ $\{\mathfrak{R}(\mathfrak{I})\}$.

В ДПАИ рассматриваются три класса допустимых преобразований изображений [4]: процедурные преобразования, параметрические преобразования и порождающие преобразования. В зависимости от класса входящих в ДАИ, описывающих ДАСПИ, преобразований выделяются три специальных класса ДАСПИ: процедурные, параметрические и порождающие.

Утверждение 4. *Множество* $\{\mathfrak{R}(\mathfrak{I})\}$ *является топологическим пространством ДАСПИ.*

Доказательство. На множестве ДАСПИ задаются три топологии:

1) процедурная топология T_T,
2) параметрическая T_P,
3) порождающая топология T_G.

Каждая топология включает систему подмножеств множества ДАСПИ, состоящую из $\varnothing$, самого множества $\{\mathfrak{R}(\mathfrak{I})\}$ и соответственно подмножеств всех: а) процедурных ДАСПИ, б) параметрических ДАСПИ, в) подмножеств порождающих ДАСПИ. Тогда для любой из трех топологий верно, что:

1) объединение произвольного семейства множеств, принадлежащих T_T, T_G, T_P, принадлежит соответственно T_T, T_G, T_P;
2) пересечение конечного семейства множеств, принадлежащих T_T, T_G, T_P, принадлежит соответственно T_T, T_G, T_P;
3) $\varnothing$, $\mathfrak{I}$ принадлежит T_T, T_G, T_P.

Построенные таким образом топологии удовлетворяют всем свойствам топологии. Эти три топологии задают три топологических пространства. ■

На рис. 1 схематично представлен процесс порождения ДАСПИ:

1) из множества преобразований $\{\widehat{O}\} \subseteq \{O\}$ на основе $\{\hat{I}_0\} \subseteq \{I_0\}$ выбираются необходимые преобразования анализа и обработки изображений $o_1, \ldots, o_{t_1}, o_{t_1+1}, \ldots, o_{t_1+t_2}, \ldots, o_{t_{n-1}+t_n}$;
2) все преобразования анализа и обработки изображений задаются путем записи ДАИ над преобразованиями изображений, элементами которых они являются (т. е. для любого преобразования o_i существует единственная базовая ДАИ D_j над преобразованиями изображений, такая, что $o_i \in D_j,\ i, j \in \mathbb{Z}$);
3) для последовательно применяемых преобразований к выбранным реализациям изображения записываются последовательные цепочки ДАИ и выбранные реализации;
4) построенные таким образом схемы образуют ДАСПИ (на рис. 1 множества A, B и C являются подмножествами множества целых чисел $\mathbb{Z}$);

$$\left.\begin{array}{c} D_1 \dots D_{i_1} \to \{I'_i\}_{i\in A\subset\mathbb{Z}} \\ D_{i_1+1} \dots D_{i_1+i_2} \to \{I'_i\}_{i\in B\subset\mathbb{Z}} \\ \dots \\ D_{i_{n-1}+1} \dots D_{i_{n-1}+i_n} \to \{I'_i\}_{i\in C\subset\mathbb{Z}} \end{array}\right\} \xrightarrow{(+,*,\alpha\cdot)} \{\mathfrak{R}(\mathfrak{I})\}$$

Рис. 1. Схема синтеза ДАСПИ.

5) последние могут объединяться путем алгебраических операций сложения $(+)$, произведения $(*)$ или умножения на элемент поля $(\alpha\cdot)$, введенных в пространстве ДАСПИ с помощью базовых ДАИ над ДАСПИ.

Все преобразования анализа и обработки изображений задаются путем записи ДАИ над преобразованиями изображений, элементами которых они являются, для того чтобы существовала возможность варьировать методы решения подзадачи, используя различные операции анализа изображений фиксированных ДАИ и сохраняя в целом схему технологии извлечения информации из изображений без изменения. На процедурной, параметрической и порождающей топологии вводятся базовые ДАИ над процедурными, параметрическими и порождающими преобразованиями изображений.

Для обеспечения возможности применения алгоритмов распознавания к построенным формальным описаниям изображений необходимо реализовывать построенные схемы (задавать конкретные преобразования из фиксированных ДАИ и параметры выбранных в схемах преобразований) и применять реализованные схемы к исходным данным, т. е. строить ДМИ.

Определение 4. *Реализацией* $\{\mathfrak{R}'(\mathfrak{I})\}$ *ДАСПИ* $\{\mathfrak{R}(\mathfrak{I})\}$ *называется результат фиксации конкретных преобразований и их параметров в* $\{\mathfrak{R}(\mathfrak{I})\}$.

Пример реализации ДАСПИ можно найти в [6]: построенная ДАСПИ на каждом шаге алгоритмической схемы конкретизировалась путем выбора преобразования, принадлежащего специализиваронной ДАИ, описывающей шаг.

Утверждение 5. *Множество реализаций ДАСПИ образует топологическое пространство реализаций ДАСПИ.*

Утверждение доказывается аналогично предыдущему случаю: задаются 3 топологии в зависимости от типа операций, входящих в специальные порождающие, параметрические и процедурные реализации ДАСПИ.

На множестве реализаций ДАСПИ можно ввести ДАИ над реализациями ДАСПИ в зависимости от типа входящих в него операций.

Определение 5. *Моделью изображения* $M(I)$ *является формальное описание, построенное в результате применения* $\mathfrak{R}'(\mathfrak{I}) \in \{\mathfrak{R}'(\mathfrak{I})\}$ *к* $\{\hat{I}'\} \subseteq \{I'\}$ *или к* $\{\hat{I}'\} \subseteq \{I'\}$ *после применения к реализациям изображения структурирующих элементов*

Определение 6. *ДАСПИ является корректной для данного изображения* $\mathfrak{I}$*, если она построена на основе ДАИ, определенных для данного типа изображений и для его преобразований.*

Определение 7. *Корректной моделью изображения называется модель изображения, построенная в результате применения реализации корректной ДАСПИ к реализациям исходного изображения или к реализациям изображения после применения к ним структурирующих элементов.*

Утверждение 6. *Множество моделей является топологическим пространством моделей изображений.*

Утверждение доказывается аналогично предыдущим утверждениям.

Модели изображений являются результатом приведения ПВУР (с учетом всей информации об изображении). На множестве моделей изображений вводятся базовые ДАИ над моделями изображений трех типов в соответствии с используемыми для их построения операциями.

Таким образом, все состояния и процедуры ПВУР образуют фазовое топологическое пространство — ПФИ.

Определение 8. *ПФИ — множество «состояний» изображения («исходное изображение», «реализация изображения», промежуточные «состояния» изображения, «параметрическая модель изображения», «процедурная модель изображения», «порождающая модель изображения») и множество «состояний» схем преобразования изображения («процедурные ДАСПИ», «параметрические ДАСПИ», «порождающие ДАСПИ», «общая ДАСПИ», «реализация общей ДАСПИ»).*

Его элементами являются состояния (фазы формального описания) изображения, и в этом смысле оно является фазовым пространством. Топология этого пространства задается некоторой алгебраической системой, а именно ДАИ, определяющими операции над элементами изображений, их значениями и построенными в результате применения этих операций состояниями изображения.

Аксиоматика ДПАИ

Приведенные ниже аксиомы определяют свойства и структуру ПФИ и составляют концептуальную основу процессов ПВУР, т. е. синтеза ДМИ [6, 7].

Аксиома 1 ([4]). Любому изображению I можно однозначно поставить в соответствие совокупность множеств $\left(\{\hat{I}_0\},\ \{\widehat{O}\},\ \{\widehat{M}\}\right)$, где $\{\hat{I}_0\}$ — множество исходных информаций, $\{\widehat{O}\}$ — множество преобразований, применимых ко множеству исходных информаций, и $\{\widehat{M}\}$ — множество результатов применения преобразований к исходным информациям.

Аксиома 2 ([4]). Множество преобразований состояний изображения $\{\widehat{O}\}$ задается множеством структурирующих элементов $\{\widehat{S}\}$, множеством порождающих правил $\{\widehat{R}\}$ и тремя подмножествами преобразований:

1) процедурные преобразования $\{\widehat{O}_T\}$;
2) параметрические преобразования $\{\widehat{O}_P\}$;
3) порождающие преобразования $\{\widehat{O}_G\}$.

Аксиома 3. ПФИ включает пространство реализаций изображений, пространство ДАСПИ, пространство реализаций ДАСПИ и пространство моделей изображения.

Аксиома 4. Топология ПФИ может задаваться некоторой алгеброй изображений, определяющей операции над элементами изображений, их значениями и построенными в результате применения этих операций состояниями изображения.

Аксиома 5. Процесс ПВУР полностью реализуется в рамках ПФИ с помощью ДАИ, определенных над его элементами — преобразованиями изображения и состояниями изображения. Аксиоматика и формальные конструкции ДПАИ обеспечивают способы и инструменты представления и описания изображений для их последующего анализа и оценивания.

Заключение

Аксиоматика и формальные конструкции ДПАИ обеспечивают способы и инструменты представления и описания изображений для их последующего анализа и оценивания.

Исследования ДМИ привели к систематизации и стандартизации системы понятий, характеризующих исходную информацию — изображения — в задачах распознавания, и введению ПФИ и иерархической системы отношений, построенных на классах этих понятий и задающих структуру ПФИ.

Основным результатом данной работы является концепция ПФИ. Сформулированные аксиомы соответствуют степени изученности ПФИ. Дальнейшие исследования будут посвящены метризации ПФИ и установлению соответствий между подпространствами ПФИ — представлениями изображений и ДАСПИ.

Литература

[1] *Журавлев Ю. И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания и классификации // Проблемы кибернетики. — Москва: Наука, 1978. — № 33. — С. 5–68.

[2] *Gurevich I. B.* The Descriptive Framework for an Image Recognition Problem // Proceedings of the 6th Scandinavian Conference on Image Analysis, Oulu: Pattern Recognition Society of Finland, 1987. — Vol. 1. — Pp. 220–227.

[3] *Gurevich I. B.* Descriptive Technique for Image Description, Representation and Recognition // Pattern Recognition and Image Analysis: Advances in Mathematical Theory and Applications in the USSR. — Moscow: MAIK “Interpreodika”, 1991. — Vol. 1. — Pp. 50–53.

[4] *Gurevich I. B., Yashina V. V.* Descriptive Approach to Image Analysis: Image Models // Pattern Recognition and Image Analysis: Advances in Mathematical Theory and Applications. — Moscow: MAIK “Nauka/Interperiodica”/Pleiades Publishing, Inc., 2008. — Vol. 18, No. 4. — Pp. 518–541.

[5] *Gurevich I. B., Yashina V. V., Koryabkina I. V., Niemann H., Salvetti O.* Descriptive Approach to Medical Image Mining. An Algorithmic Scheme for Analysis of Cytological Specimens // Pattern Recognition and Image Analysis: Advances in Mathematical Theory and Applications. — Moscow: MAIK “Nauka/Interperiodica” / Pleiades Publishing, Inc., 2008. — Vol. 18, No. 4. — Pp. 542–562.

[6] *Gurevich I. B., Yashina V. V.* Image Representation and Formalization // Материалы XV Международной конференции по нейрокибернетике, Ростов-на-Дону: Издательство ЮФУ, 2009. — Т. 3. — С. 29–56. (Proceedings of the XV International Conference on Neurocybernetics. The Fifth International Young Scientists School Neuro-2009: “Neuroinformatics, Neurocybernetics, Neurocomputers”. Lectures)

[7] *Gurevich I. B., Yashina V. V.* Image Formalization via Descriptive Image Algebras // Image Mining Theory and Applications: Proceedings of the 3rd International Workshop on Image Mining Theory and Applications — IMTA 2010 (in conjunction with VISIGRAPP 2010), Portugal: INSTICC PRESS, 2010. — Pp. 19–28.

Геометрический подход к комбинированию алгоритмов поиска лиц на изображениях*

Дегтярёв Н. А., Середин О. С.
n.a.degtyarev@gmail.com, oseredin@yandex.ru
Тула, Тульский государственный университет

В данной работе предлагается метод комбинирования результатов работы алгоритмов поиска лиц на изображениях, основанный на геометрическом положении результатов детектирования. Основанная идея предложенного метода комбинирования заключается в обнаружении групп близких в некотором смысле результатов детектирования лиц на изображении различными алгоритмами и их дальнейшего усреднения. Решение о выборе в качестве окончательного результата той или иной группы принимается в зависимости от числа алгоритмов, объединённых в них. В экспериментальном исследовании предложенного подхода использовалось семь алгоритмов; статья содержит практические результаты их комбинирования.

A geometric approach to face detectors combining*

Degtyarev N. A., Seredin O. S.
Tula State University, Tula, Russia

In this paper, a method of face detectors combining based on the geometry of their results are proposed. The main idea of the method is consist in finding groups of "similar" (in some way) face detection algorithms' results and their further averaging. Decision-result is based on the count of algorithms involved in the group. The experimental investigation of proposed method involved seven algorithms; the article contains the practical results of their combination.

Передовые реализации алгоритмов поиска лиц на изображениях в последние годы демонстрируют очень высокие показатели качества [1, 2, 3, 7]. Однако даже лучшие из них пока ещё допускают ошибки детектирования, не свойственные человеческому восприятию. В упомянутых практических исследованиях качества средств поиска лиц на изображениях уровень ошибок лучших из них на весьма существенной базе изображений был порядка 5%. Однако отмечалось, что реально «трудных» изображений, на которых ни один из тестируемых алгоритмов не смог верно найти область лица с заданной точностью, оказалось совсем мало — около 0,13%, т. е. искомая область даже на сложных изображениях указывалась хоть каким-то из алгоритмов. Этот факт натолкнул авторов на мысль построить методику, комбинирующую результаты нескольких разнородных методов поиска лиц на изображениях; таким образом при принятии решения будут учтены результаты работы нескольких (в настоящее время авторы имеют возможность экспериментировать с 7-ю реализациями) алгоритмов, что по нашему мнению, позволит «дожать» качество поиска лиц до близкого к 100%. Использование результатов нескольких алгоритмов кажется нам разумным потому, что идеи, реализованные в различных средствах поиска лиц, отличаются разнообразием и порой даже изощрённостью. Пытаться улучшать одну из моделей — путь экстенсивный. Даже у лучших алгоритмов есть свои слабые стороны — часть моделей плохо отрабатывает наклоны головы, неравномерность освещения, для других неприемлемо наличие очков, усов, бороды и т. п. Проблема усугубляется тем, что надо контролировать два уровня ошибок — первого и второго рода: кроме уверенного детектирования лица, от алгоритма требуется стойкость к ложным срабатываниям на различных видах фона, текстур и т. п. Комбинируя уже готовые решения, мы фактически рассматриваем их как чёрные ящики, не вникая в суть внутренней реализации. Наша задача — организовать надстройку, которая бы обладала лучшими показателями чем любая из составляющих её компонент. Понятно, что при реализации идеи комбинирования нескольких алгоритмов поиска лиц на изображениях мы столкнёмся с проблемой увеличения времени обработки. Наши исследования показали, что время поиска лица на изображении среднего размера занимает на современных процессорах несколько десятков миллисекунд, и для практических задач этого обычно более чем достаточно. Кроме того, тенденции в развитии многоядерных процессоров позволяют очень легко, практически естественным образом (один поток — одна задача) распараллелить общую процедуру. В этой работе мы, по-видимому впервые, вводим термин комбинирование детекторов лиц (face detectors combining, по аналогии с термином комбинирование классификаторов — classifiers combining, предложенного Дж. Киттлером [8] и Р. Дьюином), и строим простейшую версию такого алгоритма, опирающуюся

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-07-00394-а.

на геометрические отношения между результатами поиска лиц несколькими алгоритмами.

Модель представления лиц

Существуют различные модели представления лиц, например, центром и радиусом окружности, описывающей лицо, центром и размером объемлющего его квадрата, координатами центров глаз, опорными точками контура лица и т. д. В этой работе мы будем представлять лица в виде координат центров глаз, под которыми понимаются центры зрачков. Для такой модели описания лица, во-первых, представляется более удобным определение различия двух результатов поиска; во-вторых, алгоритмы распознавания лиц по фотопортрету обычно требуют предварительного совмещения центров глаз обучающей выборки; в-третьих, эксперты более быстро и точно размечают центы глаз, чем прямоугольные или овальные области. Таким образом, далее под термином *лицо* мы будем понимать координаты левого и правого глаза. В случае если алгоритм поиска лиц возвращает прямоугольную область, мы будем использовать функцию, которая, имея на входе прямоугольный фрагмент, выдаёт координаты центров глаз [1, 3, 5, 10].

Модель точности локализации лиц

Будем считать, что лицо обнаружено правильно, если экспериментально найденное положение глаз попадают в окружность диаметром D_{Eyes}, зависящего от расстояния между глазами (l_{Eyes}) и параметра α, принятого в работе равным 0,25:

$$D_{Eyes} = 2\alpha \times l_{Eyes}, \quad \alpha = \text{const}. \tag{1}$$

Заметим, что изначально такая модель точности локализации лиц была предложена О. Джесорски [6].

Геометрический метод комбинирования алгоритмов поиска лиц на изображениях

Определение 1. *Под расстоянием между парой лиц будем понимать максимальное расстояние между соответствующими парами глаз (левый с левым; правый с правым), т. е.:*

$$d_{Faces}(g,h) = \max\Big(\big\|Eye^g_{Left} - Eye^h_{Left}\big\|, \big\|Eye^g_{Right} - Eye^h_{Right}\big\|\Big). \tag{2}$$

Здесь под Eye^g_{Right} и Eye^g_{Left} понимается координаты правого и левого глаза лица обозначенного как g.

Определение 2. *Будем называть усреднённым лицом такое лицо, которое представлено координатами пары глаз, которые были получены как среднеарифметическое между соответствующими глазами (левый с левым; правый с правым) множества из K лиц, т. е.*

$$\begin{aligned} Eye^{Merge}_{Left} &= \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} Eye^i_{Left};\\ Eye^{Merge}_{Right} &= \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} Eye^i_{Right};\\ l^{Merge}_{Eyes} &= \frac{1}{K}\Big\|\sum_{i=1}^{K} Eye^i_{Left} - \sum_{i=1}^{K} Eye^i_{Right}\Big\|. \end{aligned} \tag{3}$$

Из предложенной модели точности локализации лиц (1) следует, что если результаты работы группы алгоритмов верны, то расстояние между любой парой лиц в группе будет меньше диаметра области D_{Eyes}, т. е.

$$d_{Faces}(g,h) \leqslant D_{Eyes} \leqslant 2\alpha \times l_{Eyes}, \tag{4}$$

и усреднённое лицо тоже будет принадлежать области D_{Eyes}. Если большая часть алгоритмов правильно найдёт лицо на изображении, а некоторые допустят ошибку, то усреднённое лицо уменьшит ошибку и скорее всего будет находится в области допустимых отклонений D_{Eyes}, т. е. мы можем считать такое лицо корректно найденным. На практике нам не известно, есть ли вообще лицо на изображении и координаты центров его глаз. Поэтому мы можем предположить, что в случае, если изображение содержит лицо, то правильно найденные лица будут образовывать сгущения, а ошибочно найденные лица будут распределены («разбросаны») по изображению. По аналогии, если изображение не содержит лицо, то число найденных лиц будет незначительным и они не будут образовывать сгущений. Следовательно, мы можем считать, что чем больше элементов в сгущении, тем более вероятно, что усреднённое лицо, полученное на его основе, будет принадлежать области D_{Eyes}.

Так как нам необходимо находить на изображении сгущения, то предположим что множество лиц является сгущением тогда и только тогда, когда такое множество содержит хотя бы одно лицо («центр»), расстояние от которого до любого другого лица в множестве будет меньше либо равно $2\alpha \times l^{Merge}_{Eyes}$, т. е. такие пары лиц, будут находится в соответствующих областях D_{Eyes}, образованных вокруг соответствующего усреднённого лица

$$d_{Faces}(g,h) \leqslant 2\alpha \times l^{Merge}_{Eyes}. \tag{5}$$

Такое понимание сгущения является менее строгим, чем требование попадания всех точек в область D_{Eyes} (4), но в тоже время мы предполагаем, что оно достаточно строго, что бы усреднённое лицо, полученное на основе такого сгущения, в большинстве случаев принадлежало обла-

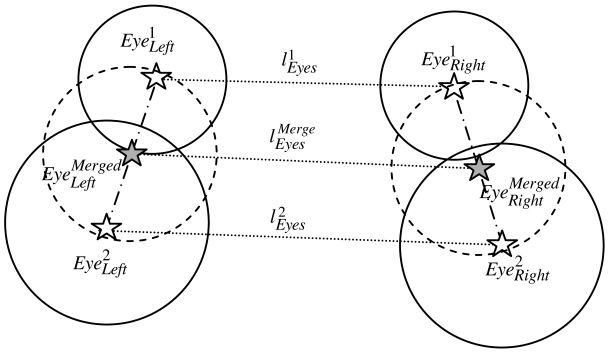


Рис. 1. Схематичное представление «компактной» пары лиц.

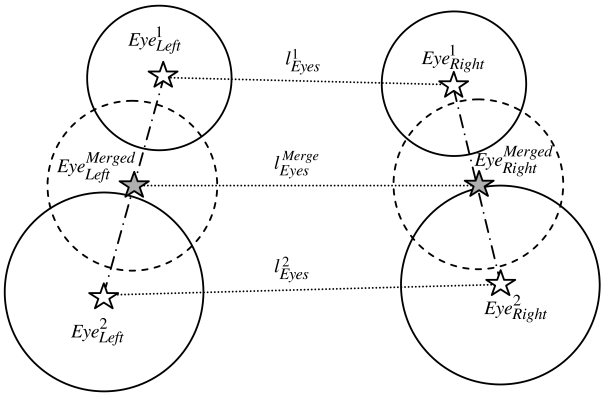


Рис. 2. Схематичное изображение не «компактной» пары лиц.

сти D_{Eyes}. Примеры «компактных» и не «компактных» пар лиц представлены на Рис. 121 и Рис. 122 соответственно.

Следует заметить, что после усреднения одного сгущения, полученное результирующее лицо может присоединится к другому сгущению и т. д. Таким образом метод геометрического комбинирования алгоритмов поиска лиц на изображениях будет иметь итеративный вид, на каждой итерации которого мы будем усреднять сгущение наибольшего размера. После завершения всех итераций результатом работы алгоритма, будем считать такое лицо, которое было получено с использованием максимального числа лиц и не менее некоторого заранее заданного порога. В случае, если это не так, то будем считать что изображение не содержит лица. Такой подход позволит нам контролировать «строгость» алгоритма, т. е. контролировать число ошибок первого и второго рода.

Формальная запись предложенного алгоритма обозначена как Алгоритм 1. Входными данными алгоритма является: α — параметр модели точности локализации (см. (1)); DetFaces — множество лиц найденных комбинируемыми алгоритмами; Threshold — минимальное необходимое число «исходных» лиц, что бы лицо, полученное в процессе комбинирования, считалось «достоверным». Выходными данными алгоритма являются либо координаты лица $(Eye_{Left}, Eye_{Right})$, либо информация об отсутствии лица на изображении (NOT_FACE).

Алгоритм 1. Геометрический метод комбинирования алгоритмов поиска лиц на изображениях.

Вход: α, Threshold;
DetFaces $= \{(Eye_{Left}, Eye_{Right}, merge_{count} = 1), \dots\}$;
Выход: $(Eye_{Left}, Eye_{Right})$
цикл
для всех $i \in$ DetFaces
Поиск группы лиц, содержащих наибольшее число элементов; i, TempFace — «центр» сгущения (5);
если размер найденного сгущения $\geqslant 1$ **то**
Усредняем лица, входящие в сгущение с «центром» TempFace и удаляем их из входного множества;
иначе
т. к. больше нечего объединять, ищем решение из оставшихся в DetFaces, полученное в результате усреднения наибольшего числа «исходных» лиц и не меньше заданного Threshold;
если такое лицо найдено **то**
вернуть его;
иначе
вернуть NOT_FACE;

Экспериментальные данные

В данной работе для создания обобщённого алгоритма использовались следующие программные реализации: Viola-Jones (OpenCV 1.0, OCV), Luxand© FaceSDK (FSDK, `http://www.luxand.com`), Face Detection Library (FDLib), SIFinder (SIF), University of Surrey (UniS), FaceOnIt (FoI, `http://www.faceonit.ch`), Neurotechnology© VeriLook (VL, `http://www.neurotechnology.com`).

Общий размер базы тестовых изображений составляет 59 890 элементов: 11 479 изображений содержащих лица и 48 211 изображений не содержащих лиц. Подробная информация об экспериментальных данных приводится в [1, 3].

Параметры оценки результатов

Если изображение содержит лицо, а алгоритм его не находит, то, очевидно, такое изображение ошибочно классифицировано (ошибка первого рода), также к ошибочно классифицированным относятся изображения, не содержащие лиц, но на которых тестируемым алгоритмом было найдено лицо (ошибка второго рода).

Результаты работы каждого алгоритма оценивались по следующим параметрам:

— FRR — доля ошибок первого рода, которая показывает вероятность не узнавания объекта своего класса;

— FAR — доля ошибки второго рода, которая показывает вероятность того, что классификатор по ошибке отнесёт объект не своего класса к объектам своего.

Анализ полученных результатов

После проведения сравнительного анализа алгоритмов, подробные результаты которого приведены в работе [3], для каждого из алгоритмов были получены параметры FRR и FAR.

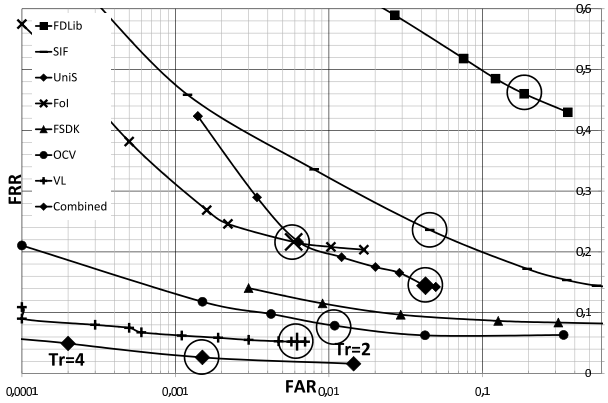


Рис. 3. Сводный график зависимости ошибок детектирования первого и второго рода протестированных алгоритмов (ROC-кривые).

Представим набор значений FRR и FAR для каждого алгоритма в виде группы точек. Каждая из таких точек будет соответствовать оценке качества распознавания изображения данным алгоритмом при определённом параметре, т. е. для каждого алгоритма мы получим ROC-кривые (рис. 3) в стандартном для биометрических систем виде [4, 9]. ROC-кривые позволяют определить наиболее подходящий алгоритм с требуемыми параметрами работы (настройки) для конкретной ситуации. Для комбинирования (кривая Combined) выбирались параметры работы алгоритмов, обеспечивающие наименьшую ошибку распознавания, т. е. имеющие наименьшее расстояние от начала координат (на ROC-кривой выделены окружностью).

Одним из способов числовой оценки уникальных особенностей детектирования алгоритма является сравнение количества уникально правильно классифицированных изображений каждого алгоритма (зафиксированные параметры) по сравнению с другими, с количеством «лёгких» и «трудных» случаев (см. таблицу 1).

Здесь под «легкими случаями» понимаются изображения, которые были верно классифицированы всеми методами, в обратной ситуации они считается «трудными случаями». Для лучшего понимания предложенного в работе метода рассмотрим несколько примеров комбинирования. На Рис. 124 и Рис. 125 представлены фрагменты изображения, на которых все семь алгоритмов правильно нашли лицо, и, как мы можем видеть, усреднённое лицо (результат комбинирования) уменьшает ошибку детектирования. На Рис. 126 представлен фрагмент лица, который был верно найден только в результате комбинирования, в то время как каждый из исходных алгоритмов поиска лиц на изображениях правильно указал не более одного глаза, но в ходе их комбинирования мы получили результат с требуемой точностью локализации.

Таблица 1. Количественные характеристики «особых» изображений в тестовой базе.

Случай	**Кол. (лиц)**	**% в базе**
«Легкие» случаи	38 478 (4 385)	64,25
«Трудные» случаи	78 (78)	0,13
только OCV	5 (5)	$< 0{,}01$
только SIF	5 (5)	$< 0{,}01$
только FDL	3 (3)	$< 0{,}01$
только FSDK	10 (10)	0,02
только UniS	20 (20)	0,04
только FoI	22 (22)	0,04
только VL	49 (49)	0,08
только Comb	3 (3)	$< 0{,}01$

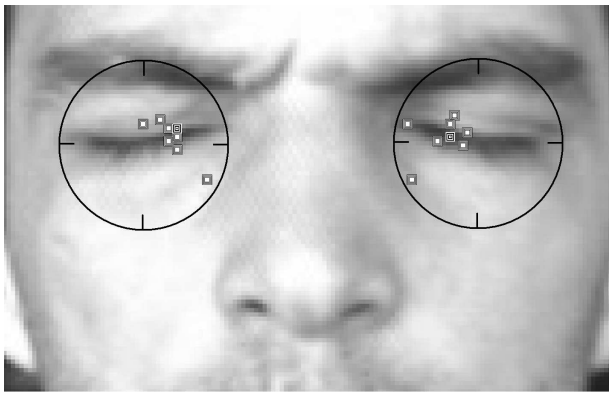


Рис. 4. Пример результатов комбинирования алгоритмов поиска лиц на изображениях; лёгкий случай, зрачки не видны.

Выводы

Как мы можем видеть, лидерами среди алгоритмов является VL (FRR: 5,23%, FAR: 0,62%), и OCV (FRR: 6,54%, FAR: 2,01%). Предложенный метод комбинирования позволяет уменьшить ошибки детектирования до FRR: 2,65%, FAR: 0,15%, и частично исправить ошибки детектирования допущенные всеми алгоритмами (см. Рис. 126).

Предложенный метод является лишь первой попыткой комбинирования алгоритмов поиска лиц на изображении и не учитывает дополнительную информацию об алгоритмах: часть алгоритмов могут выдавать свою «степень уверенности» в най-

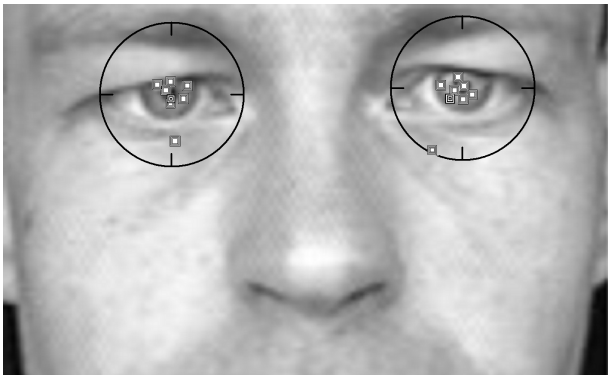


Рис. 5. Пример результатов комбинирования алгоритмов поиска лиц на изображениях; лёгкий случай, зрачки отчётливо видны.

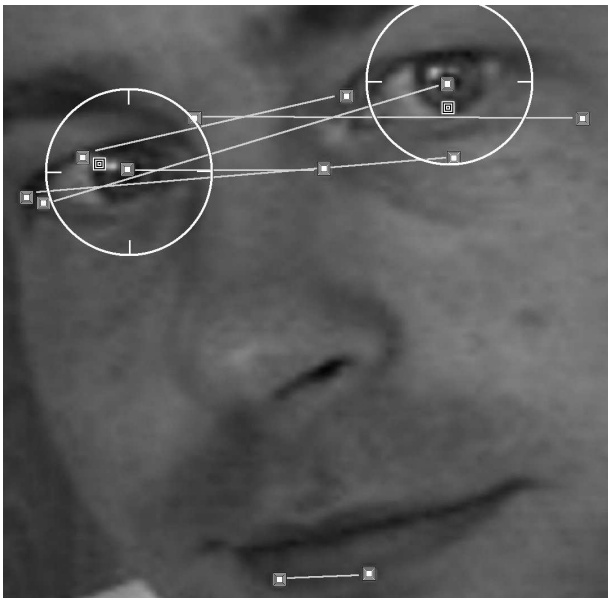


Рис. 6. Результат комбинирования алгоритмов поиска лиц на изображениях; сложный случай (линии определяют результаты работы одного алгоритма).

денном фрагменте; известные доли ошибок первого и второго рода; механизм выбора параметров настройки алгоритмов для комбинирования строится на минимизации общей ошибки детектирования, что может является не оптимальным. Также авторы надеются на сотрудничество с другими разработчиками алгоритмов поиска лиц на изображениях, так как увеличение числа используемых при комбинировании алгоритмов, может существенно повысить качество результирующего алгоритма.

Литература

[1] *Дегтярёв Н. А., Середин О. С., Крестинин И. А.* Исследование и сравнительный анализ реализаций алгоритмов поиска лиц на изображениях // Математические методы распознавания образов: 14-я Всероссийская конференция, Суздаль: МАКС Пресс, 2009. — С. 338–341.

[2] *Beveridge J. R., Alvarez A., Saraf J. et al.* Face Detection Algorithm and Feature Performance on FRGC 2.0 Imagery // Proceedings of First International Conference on Biometrics, IEEE, 2007.

[3] *Degtyarev N., Seredin O.* Comparative Testing of Face Detection Algorithms // In A. E lmoataz et al. (Eds.): ICISP 2010, LNCS 6134. — Springer, Heidelberg, 2010. — Pp. 200–209.

[4] *Fawcett T.* An introduction to ROC analysis // Pattern Recognition Letters. — Vol. 27, No. 8. — Pp. 861–874.

[5] *Hjelmas E., Low B. K.* Face Detection: A Survey // Computer Vision and Image Understanding. — 2001 — Vol. 83, No. 3. — Pp. 236–274.

[6] *Jesorsky O., Kirchberg K. J., Frischholz R. W.* Robust face detection using the hausdorff distance // Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2001. — Pp. 90—95.

[7] *Jones M. J.* Face Recognition: Where We Are and Where To Go From Here // IEEJ Trans. on Elect., Information and Systems. — 2009 — Vol. 129, No. 5. — Pp. 770–777.

[8] *Kittler J.* Combining classifiers: A theoretical framework // Pattern Analysis & Applications. — 1998. — Vol. 1, No. 1. — Pp. 18–27.

[9] *Wechsler H.* Reliable face recognition methods: system design, implementation and evaluation. — Springer, 2007. — 329 p.

[10] *Yang M. H., Kriegman D. J., Ahuja N.* Detecting faces in images: A survey // IEEE Transactions on Pattern analysis and Machine intel. — 2002. — Vol. 24, No. 1. — Pp. 34—58.

Сравнение поверхностей заданных на неструктурированных сетках и сетках разной плотности*

Дышкант Н. Ф.
natalia.dyshkant@gmail.com
Москва, МГУ им. М. В. Ломоносова

Рассматривается задача сравнения двух поверхностей, заданных облаками точек в пространстве, однозначно проецируемыми на плоскость. Эта задача сводится к задаче сравнения сеточных функций, заданных на разных сетках. Интерес представляет общий случай, при котором обе сетки являются неструктурированными и имеют разную плотность. Предлагается мера для сравнения таких функций, позволяющая оценивать разность в тех областях, где сосредоточены точки обеих сеток и алгоритм вычисления такой меры. Проведены вычислительные эксперименты на реальных данных.

Surface comparison on unstructured grids and grids of different density*

Dyshkant N. F.
Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

We consider the problem of surface comparison given as spatial point clouds that can be explicity projected onto a plane. This problem can be reduced to comparison of mesh functions given on different grids. General case when both grids are unstructured is of interest. A measure to compare such functions that allow to estimate difference on areas with vertices from both grids and an algorithm to compute it are proposed. Computing experiments on real data have carried out.

Технологии трехмерного сканирования поверхностей объектов позволяют получать дискретные модели поверхностей в виде наборов точек с трехмерными координатами. При этом сетка, на которой задается поверхность, вообще говоря, является неструктурированной (нерегулярной): точки сетки могут располагаться произвольно, то есть упорядоченная регулярная структура сетки отсутствует (см. Рис. 1).

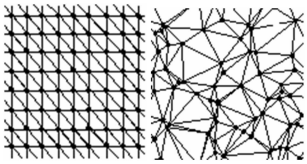


Рис. 1. Регулярная (слева) и нерегулярная (справа) триангулированные сетки.

Возникает задача определения и вычисления мер для сравнения поверхностей заданных на неструктурированных сетках.

Исходными данными являются дискретные модели поверхностей (3D точки), которые могут быть получены методом трехмерного сканирования реальных объектов.

Задача сравнения поверхностей

Исследования в области сравнения трехмерных поверхностей ведутся давно, и существует несколько подходов к решению этой задачи.

Сравнение поверхностей: обзор методов. На первом этапе многих алгоритмов происходит приведение исходных нерегулярных сеток к общей регулярной [1], а затем вычисляется мера различия между поверхностями. Большинство методов требуют значительного объема вычислений для достижения приемлемой точности в системах компьютерного зрения. На этапе приведения исходных сеток к регулярным путем интерполяции и экстраполяции значений исходных данных точность аппроксимации поверхности теряется, и, кроме того, возникает проблема выбора оптимального шага регулярной сетки. В работе предлагается метод сравнения поверхностей с сохранением исходной нерегулярности сеток.

Некоторые существующие подходы к сравнению поверхностей предполагают изначальное непрерывное представление поверхности [2], либо ее задание на регулярной сетке [3].

Существуют методы сравнения поверхностей на основе сравнений с эталоном или признаковых описаний: например, в [4] задача сравнения объектов сведена к задаче сравнения графов, вершины которого представляют собой информацию об отдельных фрагментах поверхности объекта, а ребра отображают информацию о связности этих фрагментов.

В [5] рассматривалась задача сравнения поверхностей, заданных на разных множествах точек, при этом расстояние от точки на одной поверхности до другой поверхности вычисляется вдоль нормали к ближайшему сплайну второй поверхности. Мера сравнения, основанная на вычислении разности расстояний вдоль нормалей к поверхностям,

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №08-01-00670, 10-07-00609.

интересна тем, что не требует приведения сравниваемых функций к общей сетке.

Постановка задачи. Содержательная постановка задача состоит в следующем: даны две двумерные сетки (множества точек плоскости, вообще говоря, нерегулярные) g_1 и g_2 и две сеточные функции f_1 и f_2, заданные на g_1 и g_2 соответственно. Требуется ввести меру для сравнения таких функций и алгоритм ее вычисления.

Введем обозначения: пусть T_1, T_2 и T — триангуляции Делоне, построенные на сетках g_1, g_2 и общей сетке $g = g_1 \cup g_2$ соответственно. Будем называть T *общей триангуляцией*. $\mathrm{Conv}(g)$ — выпуклая оболочка объединения двух сеток.

Меры сравнения поверхностей. В [3] мера для сравнения поверхностей вводилась как

$$\rho(f_1, f_2) = \max_{g_1[i] \in g_1} \min_{g_2[j] \in g_2} d(g_1[i], g_2[j]),$$

где $d(\cdot)$ — евклидово расстояние между двумя точками.

В [6] была предложена мера сравнения поверхностей, заданных однолистными функциями на разных нерегулярных сетках и алгоритм ее вычисления. При определении меры вычислялась сумма объемов разности между функциями по всем треугольникам триангуляции Делоне T. При этом значения исходных функций f_1 и f_2 интерполировались в точках противоположной сетки с использованием локализации триангуляций Делоне T_1 и T_2 друг в друге. В результате интерполяции получаем непрерывные функции $\hat{f}_1$ и $\hat{f}_2$, заданные на множестве $\mathrm{Conv}(g)$, при этом: $\hat{f}_1 \equiv f_1$ на g_1, $\hat{f}_2 \equiv f_2$ на g_2. Пусть $\mu(x, y)$ — функция, определяющая вес различия поверхностей в точке (x, y).

Введем обозначение:

$$V_\mu(A, B, C, f_1, f_2) = \\ = \iint\limits_{\triangle ABC} \mu(x, y) \big| \hat{f}_1(x, y) - \hat{f}_2(x, y) \big| dxdy. \qquad (1)$$

В качестве меры для сравнения поверхностей предлагалась мера:

$$\rho_{V_\mu}(f_1, f_2) = \sum_{\triangle ABC \in T} V_\mu(A, B, C, f_1, f_2) / S_{\triangle ABC}. \qquad (2)$$

Суммирование ведется по всем треугольникам объединенной триангуляции T, для нормировки объем на каждом треугольнике делится на площадь треугольника.

Мера (2) является метрикой L_1 для проинтерполированных исходных функций $\hat{f}_1$ и $\hat{f}_2$.

В качестве функции $\mu(x, y)$ бралась тождественная единица, учитывающая сходство всех фрагментов поверхностей с одинаковым весом.

Объективная природа данных такова, что сетки, на которых заданы сравниваемые функции не всегда равномерные. В реальных данных обычно присутствуют области, достаточно значимые по площади, состоящие из точек только одной из сеток.

Пусть V — значение V_μ при $\mu(x, y) \equiv 1$, а $\rho_V(f_1, f_2)$ — соответствующая V мера (1)–(2). Недостатком такой меры является то, что она с одинаковым весом учитывает разницу поверхностей и там, где точки двух сеток «перемешаны» между собой, и там, где одна из сеток гуще, чем другая.

Предлагается использовать в качестве меры сравнения такую, которая будет учитывать только репрезентативные данные — те области, где сосредоточены точки обеих сеток:

$$\rho_{\delta V}(f_1, f_2) = \sum_{\substack{\triangle ABC \in T: \\ \triangle ABC \notin T_1, \\ \triangle ABC \notin T_2}} \frac{V(A, B, C, f_1, f_2)}{S_{\triangle ABC}}. \qquad (3)$$

Замечание 1. $\rho_{\delta V}(f_1, f_2) \equiv \rho_{V_\mu}(f_1, f_2)$ при

$$\mu(x, y) = \begin{cases} 1, & (x, y) \in \triangle ABC\colon\ \triangle ABC \in T, \\ & \triangle ABC \notin T_1 \text{ или } \triangle ABC \notin T_2; \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Вычисление меры. При объединении триангуляций Делоне T_1 и T_2 некоторые ребра и треугольники перейдут без изменений в объединенную триангуляцию T, а некоторые разрушатся. Таким образом, в T будут присутствовать новые ребра и треугольники, которые будут соединять узлы из разных сеток. Будем называть такие ребра и треугольники (грани) *интерфейсными*, так как они соединяют узлы, соответствующие разным поверхностям.

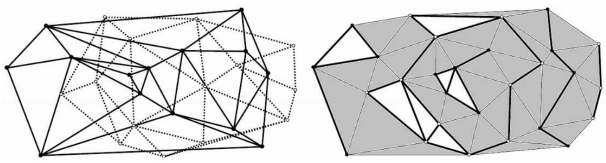


Рис. 2. Триангулированные сетки (слева) и объединенная триангуляция Делоне с закрашенными интерфейсными гранями (справа).

Мера (3) вычисляется только по интерфейсным граням. Наивный алгоритм вычисления меры проверяет все грани общей триангуляции и вычисляет объем разности только на интерфейсных гранях. Для эффективного вычисления меры различия, необходим более сложный алгоритм выделения интерфейсных граней.

Следует отметить, что в случае, когда точки обеих сеток распределены равномерно и с одинаковой плотностью (т. е. точки двух сеток хорошо

«перемешаны» между собой), все грани общей триангуляции могут быть интерфейсными. Тогда меры сравнения (2) и (3) будут равны между собой. Поэтому преимущество меры (3) проявляется в тех случаях, когда существуют значимые по площади области, в которых одна из функций представлена более детально, чем другая. В этих случаях точки сеток, на которых заданы функции, будут распределены неравномерно, либо равномерно, но с разной плотностью. На практике с таким случаем можно встретиться, например, при решении задачи подгонки друг к другу поверхностей, полученных 3D сканерами различной точности.

Алгоритм выделения интерфейсных граней

Множество интерфейсных граней распадается на несколько подмножеств, каждое из которых является цепочкой из инцидентных по ребрам треугольников: либо замкнутой, либо разомкнутой, в которой крайние треугольники имеют хотя бы одну граничную сторону, т. е. сторону выпуклой оболочки $\mathrm{Conv}(g)$ (см. Рис. 3).

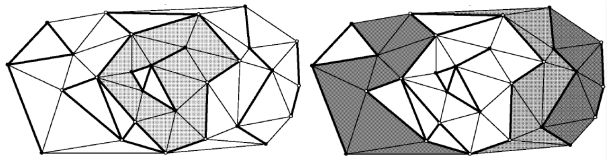


Рис. 3. Замкнутая (слева) и разомкнутые цепочки интерфейсных граней (справа).

Поэтому алгоритм выделения всех интерфейсных граней сводится к прослеживанию цепочек из таких граней.

Будем называть интерфейсное ребро общей триангуляции Делоне T из еще не прослеженной цепочки граней, стартером. Стартер инициализирует процесс прослеживания цепочки интерфейсных граней.

Тогда алгоритм выделения интерфейсных граней состоит из следующих этапов: 1) поиск начального стартера; 2) прослеживание цепочки граней, соответствующих найденному стартеру; 3) поиск очередного стартера: если стартер найден, перейти к предыдущему пункту, иначе закончить.

Рассмотрим каждый из этапов подробнее.

Поиск начального стартера. Будем считать, что узлы сеток g_1 и g_2 упорядочены лексикографически, тогда $g_1[0]$ и $g_2[0]$ — самые левые узлы сеток. Пусть $g_1[0] \prec g_2[0]$.

Для поиска *начального стартера* рассмотрим окружность, проходящую через узлы $g_1[0]$, $g_2[0]$ с центром на горизонтальном луче, выходящем из $g_2[0]$ влево. Будем называть окружность *пустой* относительно сетки, если она не содержит внутри себя узлов этой сетки. По построению рассматриваемая окружность пуста относительно g_2, однако внутри нее могут находиться узлы из g_1. Проведем через каждый из таких узлов и $g_2[0]$ окружности с центрами на том же горизонтальном луче и выберем такой узел $g_1[k]$, который лежит на окружности минимального радиуса (см. Рис. 4). Эта окружность будет пуста относительно сеток g_1, g_2, а значит и g. Поэтому для ребра, соединяющего $g_1[k]$ и $g_2[0]$, выполняется *условие Делоне* — условие существования пустой окружности, проходящей через концевые точки ребра, и оно является ребром общей триангуляции Делоне T. Ребро $g_1[k]g_2[0]$ будет начальным стартером.

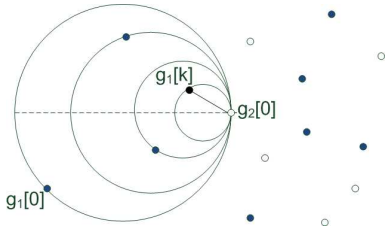


Рис. 4. Поиск начального стартера.

Прослеживание цепочки интерфейсных граней. Процесс прослеживания цепочки интерфейсных граней по найденному стартеру состоит в следующем: а) объявить стартер текущим ребром; б) произвести в триангуляциях T_1 и T_2 коррекцию ребер, инцидентных концевым узлам текущего ребра — удаляем ребра, для которых не выполнено условие Делоне; в) построить новое ребро, инцидентное текущему, соединяющее узлы разных сеток, объявить его текущим; г) удалить ребра триангуляций T_1 и T_2, пересекающие треугольную грань, образованную текущим и новым ребрами.

Алгоритм прослеживания работает аналогично алгоритму построения триангуляции Делоне, состоящему из фаз расчистки и сшивания, описанному в [7]. Если на шаге в) новое ребро совпадает со стартером, то цепочка прослеживаемых граней замкнутая; а если новое ребро построить не удалось, то цепочка разомкнутая, и текущее ребро является концевым ребром прослеживаемой цепочки, и следует продолжить процесс прослеживания от стартера в обратную сторону до тех пор, пока не будет найден второе концевое ребро цепочки.

Поиск стартеров. Поиск остальных стартеров осуществляется с помощью *минимальных остовных деревьев* (МОД) триангуляций Делоне T_1 и T_2, так как если в процессе прослеживания цепочки интерфейсных граней нарушается связность графа Делоне, то среди разрушенных ребер обязательно будет ребро МОД.

Будем называть ребра МОД триангуляций T_1 и T_2, удаленные в процессе прослеживания, *мо-*

Таблица 1. Значение мер (2) и (3) для сравнения поверхностей.

Мера сравнения	Значение меры (мм)	Комментарий
$\rho_V(S_1, S_2)$	7094	Адекватная оценка для S_1 и S_2
$\rho_V(S_1, S_2')$	17963	$\rho_V(S_1, S_2') > \rho_V(S_1, S_2)$
$\rho_{\delta V}(S_1, S_2')$	10884	$\rho_{\delta V}(S_1, S_2') \approx \rho_V(S_1, S_2')$

стами, а окружность, диаметром которой является мост — *окружностью влияния моста*. Один из концевых узлов моста принадлежит уже прослеженной интерфейсной грани, а второй узел остается свободным. Для каждого свободного узла существует инцидентный ему стартер.

Поиск стартера по свободному узлу A и мосту AB состоит из следующих шагов: а) поиск прослеженной интерфейсной грани, внутри описанной окружности которой находится свободный узел A (путем перебора вдоль AB); б) поиск смежных к найденной интерфейсных граней, внутри описанных окружностей которых находится свободный узел A; в) построение множества $D = \{D_1, \ldots, D_n\}$ узлов найденных граней, расположенных внутри окружности влияния моста AB; г) для каждого узла $D_i \in D$ построить окружность, проходящую через узлы D_i и A с центром на AB, и выбрать узел D_{i^*}, соответствующий окружности минимального радиуса (аналогично поиску начального стартера). Ребро $D_{i^*}A$, соединяющее выбранный узел со свободным, является новым стартером.

Вычислительная сложность алгоритма. Можно доказать, что вычислительная сложность алгоритма поиска всех стартеров равна $O(N)$, где N — мощность общей сетки g [8]. Минимальное остовное дерево строится за линейное время по графу Делоне с помощью алгоритма Черитона и Тарьяна. Таким образом, алгоритм выделения интерфейсных граней имеет линейную сложность.

Вычислительные эксперименты

Вычислительные эксперименты проводились на моделях человеческих лиц, снятых трехмерным сканером Broadway компании Artec Group (`www.artec-group.ru`). Использовалась база из 48 моделей лиц 8 разных людей (для каждого человека по 6 разных моделей). В качестве сравниваемых моделей (поверхностей) использовались разные модели, принадлежащие одному и тому же человеку.

Пусть S_1 и S_2 — сравниваемые поверхности, а S_2' — редуцированная (упрощенная) поверхность S_2, полученная равномерным случайным прореживанием сетки второй поверхности. При этом в результате редуцирования удалялись 15% точек модели.

Сетки поверхностей S_1 и S_2 нерегулярные, но распределены равномерно с примерно одинаковой плотностью, поэтому оценку разницы между ними с помощью меры (2) при $\mu \equiv 1$ можно считать адекватной. Примем ее значение за исходную оценку разницы между поверхностями. Сетки поверхностей S_1 и S_2' равномерные, но имеют разную плотность.

В таблице 1 приведен пример значения мер для сравнения двух поверхностей из базы. Из таблицы видно, что мера (3) более адекватно оценивает разницу между S_1 и S_2', заданными на сетках разной плотности, чем мера (2): значения обеих мер (2) и (3) больше исходной оценки, но, если значение меры (2) ее значительно превышает, то мера (3) более приближена к исходной оценке. Аналогичный результат был получен для остальных моделей базы.

Выводы

Предложена новая мера сравнения поверхностей, заданных облаками точек на разных дискретных сетках. Мера учитывает различие поверхностей в тех местах, где сосредоточены точки обеих сеток. Для эффективного вычисления меры предложен алгоритм выделения интерфейсных граней, по которым вычисляется мера, имеющий линейную сложность.

Проведены вычислительные эксперименты для сравнения поверхностей, заданных на неструктурированных сетках с разной плотностью, обосновывающие адекватность введенной меры.

Литература

[1] *Колесов А., Павлова О.* Пакет Surfer — обработка и визуализация двумерных функций // КомпьютерПресс. — 1999. — № 2/99.

[2] *Gruen A., Akca D.* Squares 3D Surface and Curve Matching // ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing. — 2005. — Vol. 59. — Pp. 151–174.

[3] *Cignoni P., Roccini C., Scopigno R.* Metro: measuring error on simplified surfaces // Computer Graphics Forum, Blackwell Publishers. — 1998. — Vol. 17 No. 2. — Pp. 167–174.

[4] *Fan T., Medioni G., Nevatia R.* Recognizing 3D objects using surface descriptions. // IEEE PAMI. — 1989. — Vol. 11 No. 11. — Pp. 1140–1157.

[5] *Schenk T.* Digital Photogrammetry. — Terra-Science, Laurelville, Ohio, 1999. — 428 p.

[6] *Dyshkant N.* Disparity Measure Construction for Comparison of 3D Objects' Surfaces // Proceedings of the Workshop IMTA, Lisbon: INSTICC Press, 2009. — Pp. 43–52.

[7] *Местецкий Л. М.* Непрерывная морфология бинарных изображений: фигуры, скелеты, циркуляры. — М.:ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 288 с.

[8] *Местецкий Л. М., Царик Е. В.* Триангуляция Делоне: рекурсия без пространственного разделения точек // Конф. «ГрафиКон'2004», Москва: Изд. отдел ф-та ВМиК МГУ, 2004. — С. 267–270.

Вероятностная потенциальная функция для распознавания изображений*

Ермаков А. С.[1]***, Середин О. С.***[2]
[1]AlexeySYermakov@newmail.ru, [2]oseredin@yandex.ru
Тула, Тульский государственный университет

В задаче анализа изображений одной из типичных причин, приводящих к изменчивости изображений являются деформации растра одного изображения относительно другого. Многие методы сравнения изображений для учета этой изменчивости прибегают к выравниванию одного изображения относительно другого (image matching). В методе опорных векторов такой способ сравнения пар изображений, основанный на поиске наилучшего совмещения оказывается непригодным, поскольку все попытки построить после этого потенциальную функцию, отвечающую условиям Мерсера [1, 2] оканчиваются неудачей. В данной работе предлагается метод построения функции сходства пары изображений, обладающей свойствами потенциальной функции, не основанный на поиске наилучшего совмещения, но, тем не менее, учитывающий возможность деформации регистрируемых изображений.

Probability kernel for image recognition*

Yermakov A. S.[1]***, Seredin O. S.***[2]
Tula state university, Tula, Russia

In image recognition systems, an appearance of objects at the input level may vary significantly. The most essential reason of such inconstancy is an image plane transformation one relative to another. Many algorithms of image similarity measurement use image matching to take into account this reason. The image matching is not suitable for construction “image kernel” for SVM method. Similarity function based on finding best match, do not meet the Mercer requirement [1, 2]. In this paper we propose to construct probabilistic image kernel not based on best match finding, nevertheless taking into account ability of image plane deformations.

Модель порождения пар изображений

В данной работе предлагается измерять близость двух сравниваемых изображений Y' и Y'' как правдоподобие гипотезы, о том, что они произошли от некоторого гипотетического изображения X, являющегося их общим прародителем, с помощью двухэтапного преобразования. На первом этапе растр исходного изображения подвергся некоторой эластичной деформации, в результате чего появилась пара деформированных потомков, а затем каждый пиксель изображения подвергся воздействию некоторого шума, что привело к изменению его яркости. Можно считать, что всякая пара изображений одного и того же распознаваемого объекта может быть получена в результате такого преобразования. Можно показать, что функция правдоподобия гипотезы о совместном происхождении пары изображений удовлетворяет всем условиям, предъявляемым к потенциальным функциям, в том числе и условию Мерсера.

Модель преобразования растра изображения

Пусть T — множество координат пикселей гипотетического изображения прародителя X, $\mathbf{t} = (t_1, t_2) \in T$ — координата произвольного пикселя на изображении-прародителе X. Естественно рассматривать изображения как функцию яркости, зависящую от двумерных координат $y(t_1, t_2) = y_{\mathbf{t}}$. Поскольку изображения заданы на дискретном растре, будем подразумевать под изображением Y множество значений яркости в точках растра $Y = \{y_{\mathbf{t}},\ \mathbf{t} \in T\}$.

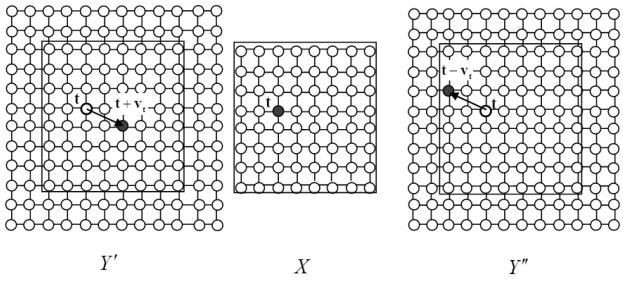


Рис. 1. Симметричный сдвиг пикселя изображения-прародителя на паре изображений потомков.

Определим деформацию растров изображений Y' и Y'' друг относительно друга следующим образом: координаты точки на изображении X преобразуются в координаты на сравниваемых изображениях в соответствии с вектором сдвига $\mathbf{v_t} \in V_{\mathbf{t}}$, определенным для каждого пикселя изображения-прародителя: $\mathbf{t}' = \mathbf{t} + \mathbf{v_t}$, $\mathbf{t}'' = \mathbf{t} - \mathbf{v_t}$ (рис. 1). Это предполагает симметричную деформацию пары изображений относительно изображения-прародителя.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 09-07-00394, № 09-07-90705, № 10-07-00489.

Для простоты будем рассматривать конечное, целочисленное множество допустимых сдвигов

$$V_{\mathbf{t}} = \left\{ \mathbf{v}_{\mathbf{t}} = (t_1, t_2) \;\middle|\; \begin{array}{l} -\Delta t_1 \leqslant t_1 \leqslant \Delta t_1 \\ -\Delta t_2 \leqslant t_2 \leqslant \Delta t_2 \end{array} \right\}.$$

Модель случайного преобразования яркости пикселей изображения

Модель деформации растра ставит в соответствие каждому пикселю исходного изображения-прародителя с яркостью x пиксель первого изображения с яркостью y' и пиксель второго изображения с яркостью y'' . Будем считать, что яркость пикселей каждого из изображений искажается на случайную величину, распределение вероятностей которой для каждого пикселя и каждого изображения независимо: $y' = x + \xi'$, $y'' = x + \xi''$, где ξ', ξ'' — нормально распределенные независимые случайные величины, причем $\mathsf{E}\xi' = \mathsf{E}\xi'' = 0$, $\mathsf{E}\xi'^2 = \mathsf{E}\xi''^2 = r$.

Априорные предположения о взаимной деформаци растра изображений

Как только мы зафиксируем какое-либо преобразование растра $V = \{\mathbf{v}_{\mathbf{t}},\ \mathbf{t} \in T\}$, как множество векторов сдвига $\mathbf{v}_{\mathbf{t}}$ в каждой точке t изображения X, мы можем говорить о правдоподобии гипотезы возникновения заданной пары изображений из одного общего прародителя при заданном преобразовании растра и заданном исходном изображении X:

$$F(Y', Y'' \,|\, V, X) = \prod_{\mathbf{t}\in T} \varphi(y'_{\mathbf{t}+\mathbf{v}_{\mathbf{t}}} \,|\, x_{\mathbf{t}}, \mathbf{v}_{\mathbf{t}}) \varphi(y''_{\mathbf{t}-\mathbf{v}_{\mathbf{t}}} \,|\, x_{\mathbf{t}}, \mathbf{v}_{\mathbf{t}});$$

$$F(Y', Y'' \,|\, V) = \int_X F(Y', Y'' \,|\, V, X) P(X) dX,$$

где $P(X) = \prod_{\mathbf{t}} \psi(x_{\mathbf{t}})$ — априорное распределение яркостей изображения X.

Введем в рассмотрение априорное распределение вероятностей на множестве всех возможных деформаций $P(V)$. Для простоты рассмотрим сначала ситуацию, когда растр T изображения прародителя представляет собой одну строку изображения (рис. 2).

Будем полагать, что модель формирования векторов сдвига является марковской цепью, и может быть задана в виде условных распределений вероятностей $P(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i-1})$, очередного вектора сдвига относительно предыдущего, и распределения вероятностей первого вектора сдвига $p(\mathbf{v}_1)$:

$$P_V(V) = p(\mathbf{v}_1) \prod_{i=2}^{N} P(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i-1}).$$

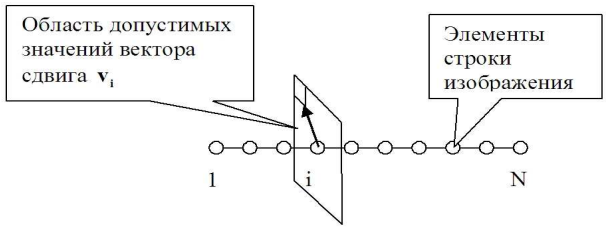


Рис. 2. Строка гипотетического изображения-прародителя.

Будем придерживаться гипотезы, что эти условные распределения являются нормальными. Искомая функция сходства может быть представлена как правдоподобие гипотезы, что пара изображений Y' и Y'' произошли от одного и того же изображения-прародителя с помощью хоть какого-нибудь преобразования растра:

$$K(Y', Y'') = \sum_V F(Y', Y'' \,|\, V)\, p(\mathbf{v}_1) \prod_{i=2}^{N} P(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i-1}).$$

Непосредственное вычисление этой суммы весьма проблематично из-за очень большого числа слагаемых. Можно заметить, что вычисление суммы может быть упрощено, если перегруппировать слагаемые. Идея способа вычисления такой суммы с помощью специфической перегруппировки слагаемых описана в [4, стр. 30].

Введем в рассмотрение вспомогательные функции $J_i(\mathbf{v}_i \,|\, Y', Y'')$, которые имеют смысл значения потенциальной функции для правой части строки изображения при условии, что в точке i зафиксирован вектор сдвига $\mathbf{v}_i$. Тогда в конце строки для $i = N$ зададим $J_N(\mathbf{v}_N \,|\, Y', Y'') = 1$, во всех же остальных элементах строки значения функций $J_i(\mathbf{v}_i \,|\, Y', Y'')$ будут вычислены рекуррентно:

$$J_{i-1}(\mathbf{v}_{i-1} \,|\, Y', Y'') = $$
$$= \sum_{\mathbf{v}_i} P(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i-1}) F(y'_{i+\mathbf{v}_i}, y''_{i-\mathbf{v}_i} \,|\, \mathbf{v}_i) J_i(\mathbf{v}_i \,|\, Y', Y'').$$

Тогда потенциальная функция для всей строки изображения может быть выражена через функцию $J_1(\mathbf{v}_1 \,|\, Y', Y'')$ в первом элементе строки:

$$K(Y', Y'') = $$
$$= \sum_{\mathbf{v}_1} F(y'_{1+\mathbf{v}_1}, y''_{1-\mathbf{v}_1} \,|\, \mathbf{v}_1)\, p(\mathbf{v}_1)\, J_1(\mathbf{v}_1 \,|\, Y', Y''). \quad (1)$$

Однако нас интересует потенциальная функция для изображения целиком, а не для отдельной строки. Граф соседства переменных для изображения наиболее естественно представлять в виде решетки. К сожалению, для графов такого вида (содержащих циклы) не удается создать неитерационный алгоритм вычисления функции правдоподобия. Тем не менее полученный алгоритм

можно обобщить на двумерные изображения, если воспользоваться древовидной декомпозицией графа соседства пикселей, часто применяемой в обработке изображений [3]. При таком способе обработки граф смежности переменных в виде решетки заменяется на граф соседства в виде дерева (рис. 3). При этом априорное распределение деформаций растра задается попарными условными распределениями векторов сдвига для тех пикселей, что связаны ребром на графе соседства.

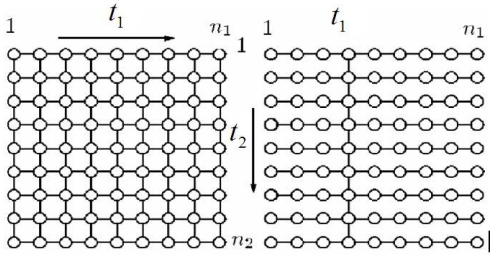


Рис. 3. Граф соседства пикселей изображения: а) решетка и б) дерево, полученное удалением из исходной решетки всех столбцов за исключением заданного (связывающего).

Для того, чтобы иметь возможность определить модель для дерева с произвольным положением связывающего вертикального столбца, нам необходимо вывести формулу, аналогичную (1), относительно произвольного положения вектора сдвига v_{bft}. Будем считать, что случайный процесс, моделирующий распределение сдвигов в строках, является эргодическим и обратимым, тогда распределение $P_V(V)$ может быть задано через условные распределения $Q(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i+1})$ текущего отсчета $\mathbf{v}_i$ относительно следующего $\mathbf{v}_{i+1}$:

$$P_V(V) = p(\mathbf{v}_N) \prod_{i=N-1}^{1} Q(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i+1}).$$

Также можно задать распределение $P_V(V)$ относительно произвольного элемента $\mathbf{t}$:

$$P_V(V) = p(\mathbf{v}_t) \prod_{i=t+1}^{N} P(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i-1}) \prod_{i=1}^{t-1} Q(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i+1}).$$

Введем в рассмотрение две функции для рекуррентного подсчета потенциальной функции с разных концов строки:

$$J^-_{i-1}(\mathbf{v}_{i-1} \,|\, Y', Y'') = \\ = \sum_{\mathbf{v}_i} P(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i-1}) F(y'_{i+\mathbf{v}_i}, y''_{i-\mathbf{v}_i} \,|\, \mathbf{v}_i) J^-_i(\mathbf{v}_i \,|\, Y', Y''),$$

$$J^+_{i+1}(\mathbf{v}_{i+1} \,|\, Y', Y'') = \\ = \sum_{\mathbf{v}_i} Q(\mathbf{v}_i \,|\, \mathbf{v}_{i+1}) F(y'_{i+\mathbf{v}_i}, y''_{i-\mathbf{v}_i} \,|\, \mathbf{v}_i) J^+_i(\mathbf{v}_i \,|\, Y', Y'').$$

Рассмотрим теперь отдельный столбец изображения t. Пусть в столбце также заданы условные распределения $R(\mathbf{v}_{t,i}, \mathbf{v}_{t,i-1})$ соседних векторов сдвигов. Как и для строк, определим функцию $J^{\text{vert}}_{t,i-1}(\mathbf{v}_{t,i-1} \,|\, Y', Y'')$ для рекуррентного подсчета потенциальной функции для всего изображения:

$$J^{\text{vert}}_{t,i-1}(\mathbf{v}_{t,i-1} \,|\, Y', Y'') = \\ = \sum_{\mathbf{v}_{t,i}} \Big\{ P(\mathbf{v}_{t,i} \,|\, \mathbf{v}_{t,i-1}) \, F(y'_{t,i+\mathbf{v}_{t,i}}, y''_{t,i-\mathbf{v}_{t,i}} \,|\, \mathbf{v}_{t,i}) \times \\ \times J^-_{t,i}(\mathbf{v}_{t,i} \,|\, Y', Y'') \, J^+_{t,i}(\mathbf{v}_{t,i} \,|\, Y', Y'') \times \\ \times J^{\text{vert}}_{t,i}(\mathbf{v}_{t,i} \,|\, Y', Y'') \Big\}.$$

Тогда значение потенциальной функции для изображений, вычисленной на основе дерева со столбцом t, будет определено после полного прохода вверх по столбцу:

$$K_t(Y', Y'') = \sum_{\mathbf{v}_{t,1}} \Big\{ F(y'_{t,1+\mathbf{v}_{t,1}}, y''_{t,1-\mathbf{v}_{t,1}} \,|\, \mathbf{v}_{t,1}) \times \\ \times p(\mathbf{v}_{t,1}) \, J^-_{t,1}(\mathbf{v}_{t,1} \,|\, Y', Y'') \, J^+_{t,1}(\mathbf{v}_{t,1} \,|\, Y', Y'') \times \\ \times J^{\text{vert}}_{t,1}(\mathbf{v}_{t,1} \,|\, Y', Y'') \Big\}.$$

Можно показать, что, построенная таким образом функция сходства удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к потенциальным функциям. Чтобы уменьшить влияние выбора столбца, предлагается в качестве потенциальной функции использовать комбинацию функций, полученных для разных столбцов:

$$K(Y', Y'') = \sum_t K_t(Y', Y'').$$

Выводы

Описанный подход принципиально отличается от процедур совмещения изображений отсутствием необходимости оптимизации того или иного критерия. Результаты модельных экспериментов подтверждают эффективность предложенного способа построения потенциальных функций на множестве изображений, применительно к задаче верификации изображений.

Литература

[1] *Mercer J.* Functions of positive and negative type and their connection with the theory of integral equations // Philos. Trans. Roy. Soc. London 1909.

[2] `http://www.cs.berkeley.edu/~jordan/courses/281B-spring04/lectures/lec3.pdf` — The Kernel Trick — 2010.

[3] *Kopylov A.* Dynamic Programming for Image Processing // Proceedings of 19th ICPR'2008, December 8–11, Tampa, Florida, USA, 2008.

[4] *Шлезингер М., Главач В.* Десять лекций по статистическому и структурному распознаванию // Киев: Наукова думка, 2004.

Вероятности распознавания направления переноса в одной модели случайного движения точки на плоскости

Жарких А. А., Бычкова С. М.
LyasnikovaSM@yandex.ru, zharkihaa@mstu.edu.ru, zharkikh090107@mail.ru
Мурманск, Мурманский государственный технический университет

Точка на плоскости совершает сложное случайное движение, которое включает в себя параллельный перенос в некотором направлении и поворот на случайный угол. Математическая модель движения строится на основе дискретного времени. В некоторый случайный момент времени начинается наблюдение за точкой. Её координаты измеряются и записываются после каждого шага случайного движения. В работе представлена методика и техника вычисления вероятностей правильного и ошибочного распознавания направления переноса как функций числа измерений координат точки.

The probabilities of the recognition of the direction of the shift in model of the random moving the point on the plane

Zharkikh A. A., Bychkova S. M.
Murmansk State Technical University , Murmansk, Russia

The point on the plane makes complex and random motion, which includes a parallel shift in a certain direction and rotation at a random angle. The mathematical model of the motion is built on base of discrete time. The observation for point is begun at a random moment of time. Coordinates of point are measured and written after each step of the random motion. In the paper we presents a methodology and technique for calculating the probabilities of correct and incorrect recognition of the direction of the parallel shift as functions of the number of the measurements of coordinates of the point.

В данной работе продолжается исследование задач, связанных со случайными поворотами точек на плоскости [1–4]. В различных технических системах движущиеся объекты представляются как множества точек плоскости. Множество точек рассматривается не обособлено, а как единый объект. Если объект совершает какое-либо сложное движение, то каждая точка представляющего его множества точек также совершает движение. Для распознавания характера движения целесообразно ввести множество признаков, представляющих собой функции координат точек представляющего множества и, возможно, некоторых других параметров объекта. Одним из требований к эффективной системе распознавания является существенное уменьшение размерности признакового пространства по сравнению с размерностью представляющего множества точек. В данной работе рассматривается объект, физически представляющий плоское абсолютно твёрдое однородное тело. С математической точки зрения то, что тело является абсолютно твердым, означает, что при любом выборе представляющего множества точек, попарные расстояния между ними не меняются. Вследствие однородности можно считать массы этих точек одинаковыми и исключить их из рассмотрения. Такому объекту можно поставить в соответствие один признак — геометрический центр масс, представляющий некоторую точку на объекте [7]. В работе предполагается, что в процессе наблюдения, координаты именно этой точки измеряются, записываются, и на их основе принимается решение.

Описание движения и наблюдения

Движение точки осуществляется в дискретном времени. За единицу времени происходит один шаг движения. За этот шаг точка и центр вращения точки смещаются вдоль некоторого направления на величину S с вероятностью p, либо с вероятностью $q = 1 - p$ на величину 0. На завершающем этапе шага точка поворачивается относительно указанного центра на случайный угол, равномерно распределенный в полуинтервале $[0; 2\pi)$. Радиус вращения точки на каждом шаге равен R. Таким образом, предполагается, что модель содержит две жестко связанные точки, расстояние между которыми равно R. Обе эти точки, как связанный объект переносятся в одном из m заданных направлений. При каждом вращении одна из точек является центром (строго одна и та же на каждом шаге). Вторая точка совершает движение по окружности радиуса R относительно этого центра на случайный угол. Координаты только этой второй точки доступны наблюдению, и её движение мы исследуем. Для описания случайных переносов точки используется симметричная модель. Считается, что перенос точки осуществляется в одном из m направлений ($m \geqslant 2$) на плоскости, разделенных углами величины $\frac{2\pi}{m}$. Наблюдателю известны значение m и одно из этих направлений. Это позволяет ему определить все направления и выбрать систему координат, ось абсцисс которой коллинеарна одному из них. В процессе движения точки её координаты измеряются, записываются и используются для распознавания направления переноса.

Предполагается, что точка двигалась до случайного момента начала наблюдений. Это означает, что наблюдатель точно уверен в существовании движения точки, и обнаруживать сам факт этого движения нет необходимости. Вследствие этого, неважно, существовало ли это движение бесконечно долго, или началось в какой-то предыдущий момент времени. Для удобства обозначим точку, в которой наблюдатель провел начальное измерение координат через B_0. Центр вращения относительно которого произошел поворот точки B_0 на случайный угол обозначим $O(x_0; y_0)$.

Методика вычисления вероятностей правильного и ошибочного распознавания направления переноса

Ставится задача проверки m гипотез по числу направлений переноса [9]. Параллельный перенос осуществляется независимо от движения поворота в одном из m направлений, задаваемых углами $\beta_r = \frac{2\pi}{m} r$, $r = 0, \ldots, m-1$, относительно некоторого центра. Цель работы — определить вероятность правильного распознавания направления переноса точки за n шагов. Обозначим H_r гипотезу, предполагающую, что анализируемая точка движется в направлении r, т. е. в направлении, которое задано углом β_r, $r = 0, \ldots, m-1$. Априорные вероятности таких движений обозначим P_r, $r = 0, \ldots, m-1$ (сумма априорных вероятностей равна 1). Зададим условные вероятности правильного распознавания направления переноса за n шагов наблюдения при условии, что движение на самом деле было в направлении r. Обозначим эти условные вероятности $P_n(H_r \,|\, H_r)$. Тогда, согласно формуле полной вероятности, вероятность правильного распознавания направления переноса за n шагов наблюдения:

$$P_{\text{true}}(n) = \sum_{r=0}^{m-1} P_r P_n(H_r \,|\, H_r). \tag{1}$$

Очевидно, вероятность ошибочного распознавания направления переноса за n шагов наблюдения:

$$P_{\text{false}}(n) = 1 - P_{\text{true}}(n). \tag{2}$$

Можно показать (что мы и делаем ниже), что в силу симметрии направлений переноса:

$$P_n(H_r \,|\, H_r) = P_n(H_0 \,|\, H_0),\ r = 0, \ldots, m-1. \tag{3}$$

Тогда вероятность правильного распознавания направления переноса не зависит от априорных вероятностей:

$$P_{\text{true}}(n) = P_n(H_0 \,|\, H_0). \tag{4}$$

Если β_r — произвольные углы, $r = 0, \ldots, m-1$, (симметрия отсутствует), тогда зависимость от априорных вероятностей остается.

В начальный момент времени координаты центра вращения наблюдаемой точки точно определены. Однако наблюдателю они не известны, так как он измеряет координаты вращающейся точки. Указанное обстоятельство влияет на структуру решающего правила процедуры распознавания. Несложно показать, что выборочные средние $(\tilde{x}_n; \tilde{y}_n)$ измеряемых координат точки асимптотически стремятся к выражениям, линейным по числу $n+1$, где n — число шагов. Постоянные слагаемые в этих асимптотических формулах представляют собой координаты центра вращения в начальный момент наблюдения. Исходя из геометрии задачи мы формируем из выборочных средних статистики средних $(\tilde{x}_{n,r}; \tilde{y}_{n,r})$ с поправкой на движение. Очевидно, что поправленные с учётом направления движения выборочные средние $(\tilde{x}_{n,r}; \tilde{y}_{n,r})$ асимптотически ведут себя следующим образом. Пара статистик $(\tilde{x}_{n,r}; \tilde{y}_{n,r})$, соответствующих истинному направлению движения, асимптотически стремится к паре координат центра вращения $(x_0; y_0)$ в начальный момент времени. Статистики $(\tilde{x}_{n,r}; \tilde{y}_{n,r})$ будут линейно зависеть от величины $n+1$. Таким образом, если ввести евклидову норму $\rho_{n,r}$ для векторов с координатами $(\tilde{x}_{n,r}; \tilde{y}_{n,r})$, то эта норма асимптотически достигает минимума на истинном направлении переноса.

Поэтому на шаге n решающее правило для проверки гипотез о направлении переноса реализуется нахождением минимума (минимум находится по значениям r):

$$l = \arg\min(\rho_{n,r}),\ r = 0, \ldots, m-1, \tag{5}$$

где $\rho_{n,r} = \sqrt{(\tilde{x}_{n,r})^2 + (\tilde{y}_{n,r})^2}$,

$$\tilde{x}_{n,r} = \tilde{x}_n - pS\frac{n+1}{2}\cos\beta_r,$$
$$\tilde{y}_{n,r} = \tilde{y}_n - pS\frac{n+1}{2}\sin\beta_r,$$

$\tilde{x}_n$ и $\tilde{y}_n$ — выборочные средние координат точки наблюдения $(x_k; y_k)$ за первые n шагов:

$$\tilde{x}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k; \quad \tilde{y}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} y_k.$$

Преобразуя неравенства, возникающие при решении задачи нахождения минимума (5), можно показать, что эта задача эквивалентна задаче нахождения максимума (максимум находится по значениям $r = 0, \ldots, m-1$):

$$l = \arg\max(\tilde{x}_n \cos\beta_r + \tilde{y}_n \sin\beta_r). \tag{6}$$

Проведем подробное обоснование анонсированных нами ранее равенств (3) и (4). Предположим, что истинный параллельный перенос соответствует направлению, задаваемому углом $\beta_0 = 0$, т. е.

осуществляется в положительном направлении оси абсцисс. На основе элементарных тригонометрических преобразований, следующих из (6), можно показать, что $P_n(H_0 \mid H_0)$ соответствует попаданию $(\tilde{x}_n; \tilde{y}_n)$ в сектор бесконечного радиуса, задаваемого углами $-\frac{\pi}{m}$ и $\frac{\pi}{m}$. Непопадание в этот сектор соответствует ошибке, т. е. выбору неверного направления переноса. Если повернуть систему координат на угол $\beta_l = \frac{2\pi}{m} l$ против часовой стрелки, то направление $r = 0$ станет направлением l и все номера направлений изменятся согласно циклической перестановке $r_1 = (l+r) \bmod (m)$. Однако это не отразится на мере сектора по сравнению с мерой плоскости, и $P_n(H_l \mid H_l) = P_n(H_0 \mid H_0)$. Вследствие вышесказанного, можно считать, что во время проведения измерений истинный перенос осуществляется по горизонтали вправо, т. е. $r = 0,\ \beta_r = 0$. В этом случае координаты точки $(x_k; y_k)$ после k шагов движения равны:

$$\begin{cases} x_k = x_0 + m_k S + R\cos\varphi_k; \\ y_k = y_0 + R\sin\varphi_k. \end{cases} \tag{7}$$

Здесь $(x_0; y_0)$ — координаты центра вращения точки B_0, причем:

$$\begin{cases} x_0 = x_{B_0} + R\cos\alpha; \\ y_0 = y_{B_0} + R\sin\alpha. \end{cases} \tag{8}$$

Такое предположение об истинном направлении движения упрощает вывод формул для расчёта вероятностей. Здесь α — случайный угол, который равномерно распределен в полуинтервале $[0; 2\pi)$, m_k — дискретная случайная величина с биномиальным законом распределения, $1 \leqslant k \leqslant n$. Необходимо отметить принципиальное отличие случайных углов α и φ_k. Наблюдателю не доступны координаты центра вращения ни на одном из шагов. В начальный момент времени координаты центра вращения определены для наблюдателя с точностью до случайного угла α. Таким образом, угол α показывает возможные положения центра вращения начальной точки наблюдения B_0 в начальный момент времени. Измерены координаты точки B_0, а центр, относительно которого B_0 повернулась, может находиться с равной вероятностью в любой точке окружности радиуса R с центром в точке B_0. Это вносит дополнительную ошибку в процедуру распознавания направления переноса. Так как наблюдателю доступны только координаты точки после нескольких шагов её случайного движения, то целесообразно выбрать случайную точку $(x_{B_0}; y_{B_0})$ в качестве начала координат. Это приводит к тому, что наблюдатель распознает только направление переноса, а не истинное положение прямой, по которой перемещается центр вращения. Угол $\varphi_k = \left(\sum\limits_{i=0}^{k} \psi_i\right) \bmod (2\pi)$. Угол ψ_i — это случайный угол поворота точки на i шаге движения. Угол ψ_i равномерно распределен в полуинтервале $[0; 2\pi)$. Таким образом, φ_k — это случайный суммарный угол поворота точки за k шагов наблюдения с начала наблюдения. Используя теорему о свертке распределений двух независимых случайных величин, правила выполнения действий по модулю 2π и метод математической индукции, можно показать, что φ_k также распределен равномерно в полуинтервале $[0; 2\pi)$. Таким образом, угол α задает неопределенность в положении прямой параллельного переноса центра вращения точки, а угол φ_k равен суммарному углу поворота точки за k шагов движения. Радиус $R = \text{const}$. Выбор начала координат в точке B_0 не ограничивает общности решения задачи. Тогда с учетом (7) и (8) выборочные средние принимают вид:

$$\begin{cases} \tilde{x}_n = R\cos\alpha + \dfrac{S}{n}\sum\limits_{k=1}^{n} m_k + \dfrac{R}{n}\sum\limits_{k=1}^{n}\cos\varphi_k; \\ \tilde{y}_n = R\sin\alpha + \dfrac{R}{n}\sum\limits_{k=1}^{n}\sin\varphi_k. \end{cases} \tag{9}$$

Поскольку в рассматриваемом случае истинное направление $\beta_0 = 0$, то из задачи нахождения максимума (6), следует неравенство:

$$\tilde{x}_n > \tilde{x}_n\cos\beta_r + \tilde{y}_n\sin\beta_r,\ r = 1, \ldots, m-1. \tag{10}$$

Очевидно, что если неравенство (10) выполняется для случая $r = 1$ или $r = m-1$, то оно будет выполняться для всех $r \neq 0$. Тогда можно показать, что при переносе в положительном направлении оси x, решение оптимизационной задачи (5) или (6) определяется попаданием в сектор бесконечного радиуса:

$$-\tilde{x}_n \operatorname{tg}\frac{\pi}{m} < \tilde{y}_n < \tilde{x}_n \operatorname{tg}\frac{\pi}{m};\quad \tilde{x}_n \geqslant 0. \tag{11}$$

Вероятность попадания в сектор, заданный углами $-\frac{\pi}{m}$ и $\frac{\pi}{m}$ равна условной вероятности правильного распознавания направления за n шагов и, с учетом симметрии, равна вероятности правильного распознавания направления параллельного переноса за n шагов. Обозначим $P_{\tilde{X}_n\tilde{Y}_n}(\tilde{x}_n, \tilde{y}_n)$ плотность распределения вероятностей системы двух случайных величин $\tilde{X}_n$ и $\tilde{Y}_n$, являющихся выборочными средними наблюдаемых координат. Соответственно $P_{\tilde{X}_n}(\tilde{x}_n)$, $P_{\tilde{Y}_n}(\tilde{y}_n)$ — одномерные плотности распределения вероятностей случайных величин $\tilde{X}_n, \tilde{Y}_n$. Тогда, согласно системе неравенств (11), вероятность правильного определения направления переноса за n шагов:

$$P_{\text{true}}(n) = \begin{cases} \int\limits_0^{+\infty} \int\limits_{-\tilde{x}_n\operatorname{tg}\frac{\pi}{m}}^{\tilde{x}_n\operatorname{tg}\frac{\pi}{m}} P_{\tilde{X}_n\tilde{Y}_n}(\tilde{x}_n, \tilde{y}_n)\, d\tilde{y}_n d\tilde{x}_n, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad m > 2; \\ \int\limits_0^{+\infty} P_{\tilde{X}_n}(\tilde{x}_n)\, d\tilde{x}_n,\ m = 2. \end{cases} \tag{12}$$

Техника вычисления вероятностей правильного и ошибочного распознавания направления переноса

Пусть M — это множество точек плоскости, которое определяется системой неравенств (11). Введем индикаторную функцию, такую что:

$$\chi(M) = \begin{cases} 1, & (\tilde{x}_n, \tilde{y}_n) \in M; \\ 0, & (\tilde{x}_n, \tilde{y}_n) \notin M. \end{cases} \tag{13}$$

Очевидно, что:

$$\chi(M) = \begin{cases} \sigma(\tilde{x}_n)\big[\sigma(\tilde{y}_n + \tilde{x}_n \operatorname{tg} \frac{\pi}{m}) - \\ \qquad -\sigma(\tilde{y}_n - \tilde{x}_n \operatorname{tg} \frac{\pi}{m})\big], \ m \neq 2; \\ \sigma(\tilde{x}_n), \ m = 2. \end{cases} \tag{14}$$

Здесь $\sigma(\cdot)$ — функция Хевисайда (единичного скачка). Если обозначить усреднение по системе двух случайных величин $\tilde{X}_n$, $\tilde{Y}_n$, чертой сверху, то согласно (12)–(14), вероятность правильного распознавания направления переноса:

$$P_{\text{true}}(n) = \overline{\chi(n)}. \tag{15}$$

Тогда вероятность неправильного распознавания направления переноса:

$$P_{\text{false}}(n) = 1 - \overline{\chi(n)}. \tag{16}$$

Очевидно, что усреднение в (15) проще выполнять не по переменным $\tilde{x}_n$, $\tilde{y}_n$, а по переменным α, φ_k и m_k. Порядок действий при усреднении следующий.

1. Функции Хевисайда, входящие в (14), представляются в интегральном виде на основе преобразования Фурье [5].
2. Представленная таким образом индикаторная функция (14) усредняется по переменным α, φ_k и m_k [8, 10].

Окончательные выражения для $P_{\text{true}}(n)$ представляют собой несобственный интеграл первого рода для $m = 2$ и линейную комбинацию одномерного и двойного несобственных интегралов первого рода для $m \neq 2$. Выражения (15) и (16) могут быть вычислены на основе теории функций комплексного переменного [6]. Анализ выражений позволяет записать вероятность правильного распознавания направления в следующем виде:

$$P_{\text{true}}(n) = f\big(n, \tfrac{S}{R}\sin(\tfrac{\pi}{m}), p, \tfrac{\pi}{m}\big). \tag{17}$$

Здесь f — некоторая функция, монотонно неубывающая по аргументам n, $\frac{S}{R}\sin(\frac{\pi}{m})$, p. В полной версии доклада будет представлен явный вид этой функции для различных значений параметров.

Заключение

В работе представлены методика и техника вычисления вероятностей правильного и ошибочного распознавания направления случайного переноса для некоторого сложного случайного движения точки на плоскости. Представленные результаты допускают точные формулировки в виде математических теорем, которые авторы предполагают представить на конференции. Представленные методика и техника могут быть обобщены на случаи более сложных движений точечных и групповых объектов. Результаты работы могут быть использованы для моделирования автоматических систем распознавания движения сложных объектов живой и неживой природы.

Литература

[1] *Бычкова С. М.* Вероятностные характеристики в задаче определения направления движения точки в одной модели случайного движения // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2010», М.: МАКС Пресс, 2010.

[2] *Лясникова С. М.* Вероятностные характеристики расстояний между точками евклидова пространства, отличающимися случайными поворотами или отражениями // Материалы докладов XV Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов», М.: Издательство МГУ; СП МЫСЛЬ, 2008.

[3] *Лясникова С. М., Жарких А. А.* Исследование распределений расстояний точек евклидова пространства при случайных аффинных преобразованиях // Доклады 14-й Всероссийской конференции «Математические методы распознавания образов», М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 49–51.

[4] *Жарких А. А., Бычкова С. М.* Методика имитационного моделирования случайных величин и процессов // Материалы Международной научно-технической конференции «Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения», М: Энергоатомиздат, 2009. — С. 84–87.

[5] *Баскаков С. И.* Радиотехнические цепи и сигналы: Учебник для вузов по спец. «Радиотехника». — 2-е изд. — М.: Высш. шк., 1988. — 448 с.

[6] *Лаврентьев М. А., Шабат Б. В.* Методы теории функций комплексного переменного. — М.: Наука, 1987. — 688 с.

[7] *Пискунов Н. С.* Дифференциальное и интегральное исчисления. Т. 1. — СПб.: Мифрил. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1996. — 416 с.

[8] *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и её приложения. Т. 1.— М.: Мир, 1964. — 498 с.

[9] *Фукунага К.* Введение в статистическую теорию распознавания образов. — М.: Наука, 1979. — 368 с.

[10] *Ширяев А. Н.* Вероятность. — М.: Наука, 1989. — 574 с.

Структурный анализ формы объекта с помощью скелетного ядра*

Жукова К. В., Рейер И. А.
kz@pisem.net,reyer@forecsys.ru
Москва, Вычислительный центр РАН

В работе рассматривается метод обобщения топологической структуры скелетного графа, описывающего форму объекта на изображении. В качестве исходного скелетного представления формы используется базовый скелет аппроксимирующей объект многоугольной фигуры, моделирующий с известной точностью фундаментальную часть скелета для любого способа аппроксимации. Для выявления основных элементов скелетного графа используются свойства скелетного ядра аппроксимирующего многоугольника — замкнутой плоской области, описывающей возможные положения скелета при различных способах аппроксимации.

Structure analysis of object shape with use of skeleton core*

Zhukova K. V., Reyer I. A.
Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russia

A method of topological structure generalization of a skeleton graph describing the shape of an object on an image is suggested. The skeleton base of a polygonal figure approximating the object is used as the original skeleton representation of a shape, modeling a fundamental part of a skeleton for any method of object approximation with controllable accuracy. To reveal principal elements of the skeleton graph, the skeleton core of an approximating polygon is used. The skeleton core is a closed planar domain describing possible positions of a skeleton for different ways of approximation.

Скелетное представление широко используется при решении задач распознавания изображений для описания структуры объекта и анализа формы. Один из подходов к построению скелетного представления формы — аппроксимация объекта многоугольной фигурой и построение скелета полученного многоугольника [1]. Впрочем, использовать такой скелет «в чистом виде» для сравнения и анализа достаточно затруднительно, так как скелет очень чувствителен к изменению границы. В частности, появление незначительных выпуклостей на границе приводит к возникновению новых ветвей скелета. Чтобы избавиться от таких «шумовых» ветвей в окрестности границы, удобно использовать базовый скелет [2, 3] — подмножество скелета многоугольной фигуры, аппроксимирующее с известной точностью фундаментальную часть скелета любой замкнутой области, близкой фигуре в смысле расстояния Хаусдорфа. Базовый скелет характеризует метрическую близость между скелетами различных аппроксимирующих фигур, что позволяет использовать его в качестве скелетной модели формы. Но при сравнении скелетов нужно учитывать не только метрическое сходство, но и оценивать их топологическую близость. В самом деле, поскольку скелет многоугольной фигуры можно рассматривать как плоский граф [4], то для похожих фигур имеет смысл требовать изоморфности их скелетных представлений: скелетные графы должны быть изоморфны и, кроме того, изоморфизм должен сохранять порядок терминальных вершин скелета [5]. Однако, даже при небольших изменениях границы могут возникать ситуации, когда меняется конструкция скелета в местах соединения ветвей (рис. 1) и, следовательно, базовые скелеты похожих фигур в общем случае не будут изоморфными. При этом в базовом скелете можно выделить два типа ветвей: «основные» (изменения границы в пределах точности не приводят к серьёзному изменению этих ветвей) и «связующие» (ветви, которые определяют способ соединения «основных» ветвей и могут появляться и исчезать при «шевелениях» границы). Исходя из этого можно сформулировать следующую задачу: требуется построить такое скелетное представление, которое определяет «основные» ветви и не содержит «связующих» ветвей. В статье [5] предложен метод

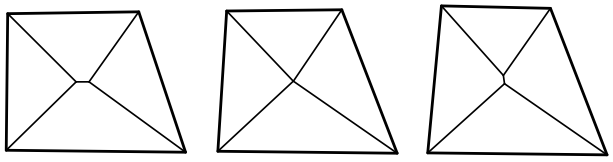


Рис. 1.

такого обобщения скелетного графа путем «склейки» узлов скелета. Идея этой «склейки» заключается в следующем: каждая ветвь скелета с нетерминальными вершинами, такая, что расстояние между вершинами достаточно мало, считается «связующей» и заменяется на один узел. При этом узел выбирают так, что восстановленный по полученному скелету силуэт отличается от исходной фигуры не более чем на заданную величину. В данной статье предлагается метод выявления в базовом скеле-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 08-07-00338 и № 08-01-00670.

те обобщенной графовой структуры, которая не зависит от способа соединения ветвей. Метод основан на следующем свойстве базового скелета: с каждым ребром базового скелета связана некоторая окрестность, собственно говоря, переменной ширины, сравнимой с ε. Внутри этой окрестности находится ветвь скелета любой замкнутой односвязной области, являющейся ε-близкой фигуре. Максимальные пустые окружности этой ветви касаются сегментов границы области, проходящих через ε-окрестности фрагментов границы многоугольной фигуры, бисектором которых является данное ребро базового скелета. Совокупность таких окрестностей образует замкнутую область — так называемое скелетное ядро [6]. Анализ свойств этой области позволяет выделить основные направления ветвей скелета и области соединения ветвей без уточнения способа соединения и тем самым избавиться от влияния «связующих» ветвей на топологическую структуру скелета.

Базовый скелет и скелетное ядро

Пусть дана односвязная многоугольная фигура P, ε — некоторое неотрицательное число. Каждой точке O скелета P соответствует максимальный вписанный (пустой) круг с центром в этой точке и радиусом r_O. Граница фигуры разбивается точками касания максимального пустого круга на $n \geqslant 2$ фрагментов (в случае терминальной вершины единственную точку касания тоже считаем фрагментом границы). Рассмотрим круг с центром в O и радиусом $r_O + \varepsilon$. Радиусы, проведенные через точки касания максимального пустого круга, разбивают окружность круга с увеличенным радиусом на n дуг, соответствующих фрагментам границы. Для каждой пары соответствующих множеств «дуга-фрагмент границы» определено расстояние Хаусдорфа между ними. Центры кругов, у которых две или более пар «дуга-фрагмент» таковы, что расстояние Хаусдорфа между элементами пары больше либо равно ε, образуют базовый скелет (рис. 2). Круг с центром на ребре базового скелета и радиусом, на ε большим радиуса соответствующего максимального пустого круга, носит название базового круга.

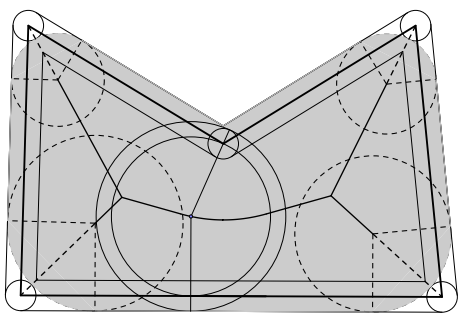


Рис. 2.

Понятие скелетного ядра многоугольной фигуры основано на следующих соображениях. Рассмотрим ребро базового скелета P — бисектор пары сайтов s_a и s_b. Пусть C — максимальный пустой круг с центром в принадлежащей ребру точке p, касающийся сайтов s_a и s_b в точках a и b соответственно. Рассмотрим C' — базовый круг с центром в точке p и его радиусы pA и pB, проходящие через точки a и b. Пусть P' — некоторая ε-близкая P в смысле Хаусдорфа область. В окрестности ребра базового скелета проходит ветвь скелета P' и пересекает один из радиусов pA и pB базового круга C'. Скелетное ядро описывает максимальное возможное отклонение таких точек пересечения от p. Для определенности предположим, что ветвь скелета P' пересекает радиус pA. Рассмотрим скелетный круг P' с центром, лежащим в точке пересечения ребра скелета и радиуса pA. Он касается границы P' в двух или более точках. Чтобы найти границу скелетного ядра, надо определить «крайние» положения q точки пересечения радиуса pA и ветви скелета P', то есть те случаи, когда P' такова, что максимальный пустой круг P' касается границы P' в точке A с одной стороны и некоторой точке b', лежащей на внутренней (по отношению к фигуре) стороне ε-окрестности границы P, с другой (рис. 3). Фактически это означает,

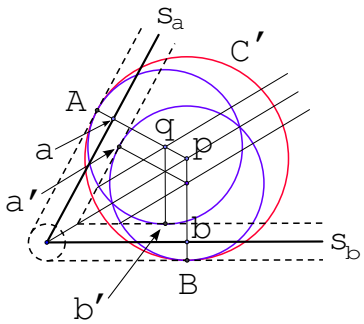


Рис. 3.

что для ребра базового скелета P надо рассмотреть множество центров кругов, лежащих на радиусах базовых кругов с центрами на рассматриваемом ребре и касающихся фрагмента «внешней» границы ε-окрестности одного касательного сайта и «внутренней» границы ε-окрестности другого сайта. Множество центров таких кругов и образует фрагмент границы скелетного ядра с одной стороны ребра скелета фигуры P. Эти круги с центрами на границе скелетного ядра будем называть граничными кругами скелетного ядра.

Рассмотрим, что представляют собой фрагменты границы ядра для ребер различных типов.

Окрестности ребер базового скелета

Ребро скелета многоугольной фигуры может быть трех типов: отрезок, порожденный парой

сайтов-сегментов; фрагмент параболы, порожденный парой сайтов «сегмент-точка»; отрезок, порожденный парой сайтов-точек. Построим границу скелетного ядра для ребер каждого из трех типов.

Пусть ребро скелета — отрезок, порожденный парой сегментов границы. Рассмотрим фрагмент границы скелетного ядра с одной стороны ребра скелета. Очевидно, что множеством центров граничных кругов ядра является отрезок прямой, параллельной соответствующему ребру скелета (рис. 3). Этот отрезок лежит на серединной оси для внешней границы ε-окрестности одного из сегментов и внутренней границы ε-окрестности другого. Аналогично строится фрагмент границы ядра с другой стороны ребра скелета.

Рассмотрим случай, когда пара сайтов состоит из сегмента и точки (рис. 4). Построим сначала часть границы скелетного ядра, лежащую между ветвью скелета и сайтом-точкой.

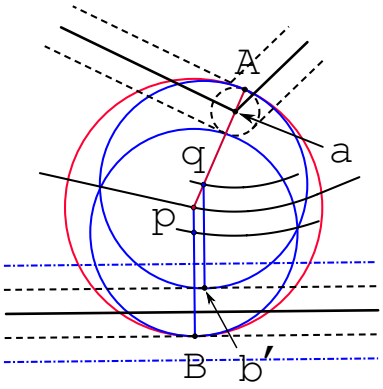


Рис. 4.

Так как $qA = qb'$, то $qa = qA - \varepsilon = qb' - \varepsilon$. Значит, множество точек, образующих границу скелетного ядра, также как и ребро скелета является фрагментом параболы. При этом фокус этой параболы совпадает с фокусом параболы — ребра скелета (сайт-точка a границы области), а директрисой является прямая, лежащая на 2ε «выше» соответствующего сегмента границы области.

Теперь рассмотрим фрагмент скелетного ядра, лежащий между ребром скелета и сегментом границы. Рассуждая аналогично, получим, что граница скелетного ядра образует параболу с фокусом в точке a и директрисой, параллельной сегменту границы, и лежащей на 2ε «ниже» этого сегмента.

Таким образом, в случае пары сайтов «сегмент-точка» фрагментами границы ядра являются фрагменты парабол. Отметим, что фрагмент границы ядра, лежащий между ребром скелета и сайтом-точкой a, является серединной осью для a и внутренней границы 2ε-окрестности сайта-сегмента. А фрагмент границы ядра, лежащий между ребром скелета и сайтом-сегментом, представляет собой серединную ось для внутренней границы ε-окрестности a (дуги окружности радиуса ε) и внешней границы ε-окрестности сайта-сегмента.

Теперь пусть пара сайтов состоит из точек (рис. 5). Для обоих фрагментов границы скелетного ядра рассуждения будут аналогичными. Нетрудно видеть, что $qA = qb - \varepsilon$. Следовательно, $qa + \varepsilon = qb - \varepsilon$, и $qa - qb = 2\varepsilon$, то есть разность расстояний от точки границы ядра до точек a и b постоянна. Значит, фрагментами границы ядра в этом случае являются ветви гиперболы с фокусами в сайтах-точках. Аналогично рассмотренным ранее случаям, каждый из фрагментов представляет собой серединную ось для одного из сайтов-точек и внутренней границы 2ε-окрестности второго.

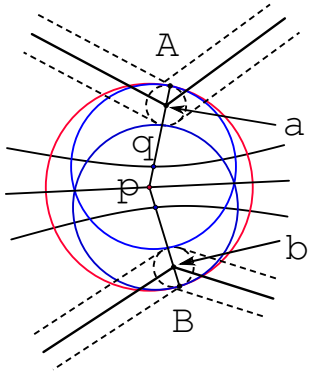


Рис. 5.

Граница скелетного ядра

По описанным выше правилам для каждого ребра базового скелета фигуры P можно построить фрагменты границ скелетного ядра. Рассмотрим, что представляет собой граница ядра для всего базового скелета.

На рис. 6 приведен пример границы скелетного ядра для ребер базового скелета, сходящихся в узле степени 3. Возможные положения ветвей скелетов близких областей, соответствующих ребру m_1, со стороны сегмента s_1 ограничены серединной осью внешней границы ε-окрестности s_1 и внутренней границы ε-окрестности сегмента s_3. Аналогично, соответствующие ребру m_2 ветви лежат «ниже» серединной оси внешней границы ε-окрестности s_1 и внутренней границы ε-окрестности s_2. При этом на ребре m_1 можно выделить фрагмент, на котором соответствующие граничные круги ядра касаются внутренней границы ε-окрестности s_2. Это означает, что перпендикулярный s_1 радиус такого базового круга могут пересекать не только ветви, соответствующие m_1, но и ветви, соответствующие m_2. Следовательно, у этого фрагмента граница скелетного ядра лежит на той же серединной оси, что и граница у m_2. Соответственно, граница ядра, лежащая между сегментом s_1 и ребрами m_1 и m_2,

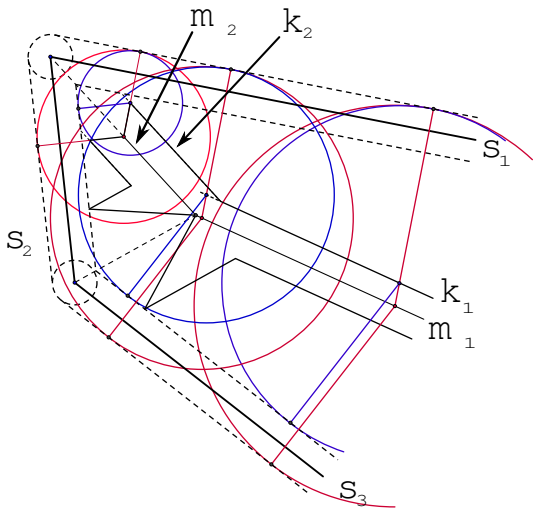


Рис. 6.

состоит из пары отрезков k_1 и k_2 и является фрагментом скелета фигуры, контур которой образуют, в частности, внешняя граница ε-окрестности s_1 и внутренние границы ε-окрестностей s_2 и s_3.

Обобщив эту идею, получим, что для построения скелетного ε-ядра необходимо рассмотреть некоторый набор фигур $P_1, \ldots, P_n$, которые определяются параметром ε и видом исходной фигуры P. В этот набор входят фигуры, построенные следующим образом.

Разобьем границу исходной фигуры всеми вершинами выпуклых углов на фрагменты. Каждый фрагмент — это ломаная линия из сторон фигуры. Концы её — это вершины выпуклых углов, а все остальные угловые точки — вершины вогнутых углов фигуры. Для каждой стороны в таком фрагменте рассмотрим фигуру, образованную прямой, на которой лежит внешняя граница ε-окрестности стороны, и внутренними границами ε-окрестностей остальных фрагментов. Для каждой вершины вогнутого угла P, принадлежащей фрагменту, рассмотрим фигуру, образованную инцидентными вершине сторонами и внутренними границами 2ε-окрестностей остальных фрагментов

Далее для каждой фигуры P_i из набора строим скелет S_i. В полученном скелете выбираем ребра, максимальные пустые круги которых касаются внешней границы окрестности соответствующей фигуре стороны границы P (в случае, когда фигуре P_i соответствует вершина вогнутого угла P, выбираем те ребра, максимальные пустые круги которых касаются этой вершины). На этих ребрах лежит соответствующая данной стороне или вершине часть границы скелетного ядра.

Теперь для каждого ребра базового скелета многоугольной фигуры, максимальные пустые круги которого касаются определенной стороны или вершины, рассмотрим радиусы базовых кругов с центрами в вершинах ребра. Точки пересечения радиусов базовых кругов с выбранными ребрами скелета соответствующей фигуры P_i выделяют часть границы скелетного ядра, соответствующую данному ребру базового скелета и стороне или вершине границы многоугольной фигуры.

Таким образом, граница скелетного ядра многоугольной фигуры представляет собой совокупность фрагментов скелетов фигур из набора $P_1, \ldots, P_n$ и отрезков радиусов базовых кругов с центрами в терминальных вершинах базового скелета (рис. 7).

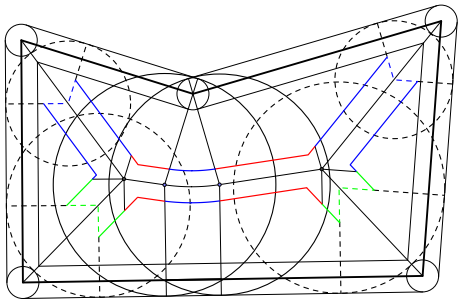


Рис. 7.

Выявление «основных» ветвей и мест их соединения

Посмотрим, как меняется структура скелетного ядра при увеличении параметра ε. Рассмотрим фигуру P_i из набора $P_1, \ldots, P_n$. С увеличением ε фрагменты границы P_i, соответствующие внутренним границам ε-окрестности контура P, двигаются внутрь фигуры P, а фрагмент, соответствующий внешней границе ε-окрестности контура — наружу. При этом, в общем случае, происходит упрощение фигуры P_i, и следовательно, в скелете S_i исчезают ветви. Это означает, что у ряда ребер базового скелета соответствующие им фрагменты границы скелетного ядра «замещаются» фрагментами границы окрестностей соседних ребер. Можно сказать, что у таких ребер нет собственной окрестности в скелетном ядре. На рис. 8 и 9 изображен пример скелета одной из фигур P_i для некоторых значений точности аппроксимации ε_1 и ε_2: $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$. Видим, что при точности ε_1 «центральная» ветвь базового скелета P, соединяющая четыре остальных ребра, имеет свою границу ядра, а при точности ε_2 этого фрагмента границы уже нет.

Таким образом, базовый скелет можно представить в виде обобщенного графа, ребрам которого соответствуют ветви базового скелета, имеющие собственные окрестности в скелетном ядре, а вершинам — подграфы базового скелета, в которые входят ребра, не имеющие собственных окрестностей. Ребра обобщенного графа определяют основные направления ветвей скелетов ε-близких об-

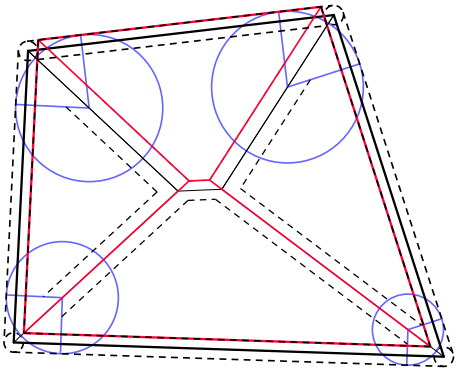


Рис. 8.

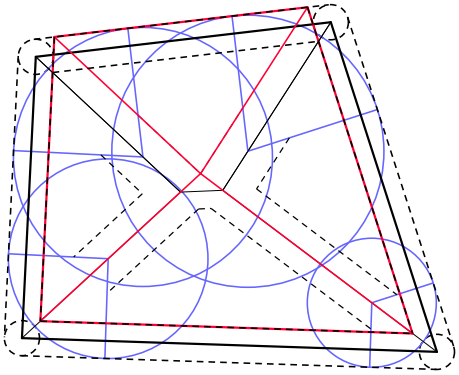


Рис. 9.

ластей, а вершины указывают области, в которых соединяются «основные» ветви, без указания конкретного способа соединения.

На рис. 10 и 11 приведен пример обобщенных скелетных графов для двух близких многоугольных фигур. Характер соединения «основных» ветвей в скелетах этих фигур различен, но конструкция скелетных ядер и обобщенная структура скелетов будет одинакова.

Выводы

В работе предложен метод построения обобщенного скелетного представления объекта с использованием базового скелета и скелетного ядра аппроксимирующей объект многоугольной фигуры. Показано, что устройство скелетного ядра определяет в базовом скелете «устойчивые» ветви и общий способ их соединения, который не зависит от выбора аппроксимирующей фигуры. Это свойство позволяет использовать сходство скелетных ядер для анализа и сравнения формы фигур. Введение формального определения меры близости для скелетных ядер многоугольных фигур и разработка процедур сравнения ядер представляют предмет дальнейшего исследования.

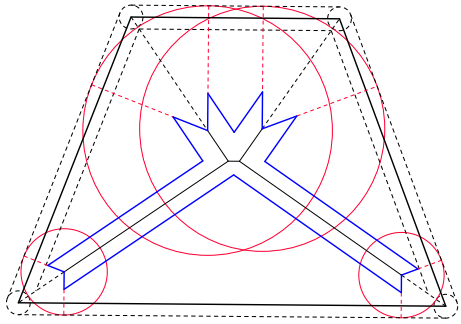


Рис. 10.

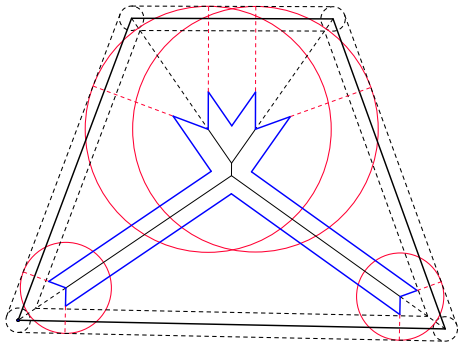


Рис. 11.

Литература

[1] *Местецкий Л. М.* Непрерывная морфология бинарных изображений: фигуры, скелеты, циркуляры — Москва: Физматлит, 2009. — 288 с.

[2] *Местецкий Л. М., Рейер И. А.* Непрерывное скелетное представление изображения с контролируемой точностью // Труды 13 международной конф. ГРАФИКОН-2003, Москва, 2003, С. 246–249.

[3] *Жукова К. В., Рейер И. А.* Параметрическое семейство гранично-скелетных моделей формы // Доклады всероссийской конференции ММРО-14, 2009, С. 346–350.

[4] *Choi H. I., Choi S. W., Moon H. P.* Mathematical Theory of Medial Axis Transform // Pacific Journal of Mathematics, Vol. 181, No. 1, 1997.

[5] *Domakhina L., Okhlopkov A.* Shape comparison based on skeleton isomorphism // Proceedings of International conference on computer vision theory and applications (VISAPP 2009), Lisbon, Portugal, 2009.

[6] *Жукова К. В., Рейер И. А.* Скелетное ядро многоугольной фигуры // Интеллектуализация обработки информации: Тезисы докладов Международной научной конференции, Симферополь, 2008, С. 108–109.

Геометрия знакового представления изображений и её приложение к исследованию устойчивости к шумам*

Каркищенко А. Н., Гончаров А. В.
karkishalex@gmail.com, ag.tsure@gmail.com
Москва, НИИАС

Вводится понятие устойчивости знакового представления изображений. Получены оценки меры устойчивости знакового представления изображений, зашумленных нормальным аддитивным шумом.

Geometry of an image sign representation and its application to analysis of a stability with respect to noise*

Karkishchenko A. N., Goncharov A. V.
IRITAT, Moscow, Russia

The notion of a stability of an image sign representation is introduced. Estimates of a stability measure of an image sign representation under gaussian additive noise are represented.

При обработке изображений приходится иметь дело с некоторой идеализированной моделью изображения, которую можно назвать *моделью представления* или просто *представлением*. Например, оцифровка, т. е. дискретизация области определения изображения и квантование функции яркости, является примером такой модели.

В данной работе рассматривается знаковое представление изображения, суть которого заключается в описании изображения с помощью отношений квазипорядка на множестве пикселей изображения. Идея перехода от исходного представления сигнала или изображения к знакам некоторого функционала известна, однако системного изучения свойств подобного представления не проводилось. В [1] предлагается непараметрический подход к анализу статистических данных, в котором выводы основываются не на самих данных, а на знаках определенных от них функций. В [2] предложен подход к поиску изображений по визуальному подобию, в котором в качестве признаков изображения используются знаки коэффициентов вейвлет-преобразования. В [3, 4] рассматривается применение знакового представления в задачах детекции и идентификации лиц на изображениях.

Важным свойством модели является ее неизменность при определенных изменениях самого изображения. Это свойство естественно назвать *устойчивостью представления*.

Знаковое представление и структура порождаемых им орбит

Пусть $F = \big(f(i,j)\big)$ — изображение, заданное на равномерной сетке $\Omega = I_w \times I_h = \{1,\dots,w\} \times \{1,\dots,h\}$. Будем считать, что $f_{ij} \in [0,1]$, т. е. функция яркости изображения может принимать любые действительные значения из отрезка $[0,1]$.

Пусть $x, y \in \Omega$. Отношение $S \subseteq \Omega \times \Omega$ будем называть *знаковым представлением* изображения F, если выполняются следующие условия:

1) $(x,y) \in S$, если $f(x) \leqslant f(y)$;

2) $(x,y) \in S,\ (y,x) \notin S$, если $f(x) < f(y)$.

Пусть σ — отображение, которое изображению F ставит в соответствие знаковое представление S, т. е. $S = \sigma(F)$. В частности, $\sigma^{-1}(S)$ означает множество всех изображений, имеющих одно и то же знаковое представление S. Обозначим через $\mathbb{S}$ множество всех знаковых представлений изображений одного размера.

Под *полным знаковым представлением* будем понимать такое представление, которое обладает свойством связности, т. е. содержит все пары точек изображения: $S = \big\{(x,y) \in \Omega^2 | f(x) \leqslant f(y)\big\}$.

Назовем *оконным знаковым представлением* такое знаковое представление, когда учитываются лишь отношения на смежных точках: $S = \big\{(x,y) \in \Omega^2 | f(x) \leqslant f(y), \rho(x,y) \leqslant \varepsilon\big\}$, где $\rho(x,y)$ — некоторая функция расстояния.

Знаковое представление будем называть *инвариантным* относительно преобразования ψ, действующего на изображениях, если для любого изображения F и изображения $H = \psi(F)$ выполняется равенство $\sigma(H) = \sigma(F)$. Нетрудно доказать

Утверждение 1. *Знаковое представление S является инвариантным относительно строго монотонно возрастающего преобразования (с.м.в.п.) $\varphi\colon [0,1] \to [0,1]$, действующего на значениях функции яркости.*

Пусть Φ — множество с.м.в.п. $\varphi(x)$, $\varphi(0) = 0$, $\varphi(1) = 1$, определенных на значениях изображения F. Множество Φ с операцией суперпозиции образует группу инвариантных преобразований. Из этого, в частности, следует, что $\sigma^{-1}(S)$ замкнуто относительно действия этих преобразований.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №10-07-00478, №08-07-00129.

Исследуем структуру множества изображений, совпадающих с точностью до с.м.в.п. значений функции яркости.

Утверждение 2. *Множество* Φ *с.м.в.п.* $\varphi(x)$ *на* $[0,1]$, $\varphi(0)=0,\ \varphi(1)=1$, *является выпуклым.*

При действии группы Φ множество $\sigma^{-1}(S)$ распадается на *орбиты* (*транзитивные классы*), которые образуют разбиение множества изображений из $\sigma^{-1}(S)$. Каждая орбита порождается любым своим элементом F^0 и группой Φ, т. е. $\mathrm{Orb}_\Phi(F^0) = \{F \mid F=\varphi(F^0),\ \varphi\in\Phi\}$. Справедливо

Утверждение 3. *Орбиты при действии группы* Φ *являются выпуклыми множествами.*

Исследуем структуру орбит. Будем вначале считать, что выполняются следующие условия.

Условие 4. Значения функции яркости могут принимать любые значения из интервала $(0,1)$.

Условие 5. Во всех точках значения функции яркости различны.

Введем фиксированную «одномерную» нумерацию элементов изображения F, например, слева-направо и сверху-вниз, т. е. $F = (f_1\, f_2\, \ldots\, f_{wh})$. Тогда любое изображение будет представляться точкой в 2^{wh}-мерном единичном кубе. Пусть π — такая перестановка индексов в $F^0 = (f^0_1\, f^0_2\, \ldots\, f^0_{wh})$, при которой компоненты этого вектора упорядочены по возрастанию, т. е.

$$f^0_{\pi(1)} < f^0_{\pi(2)} < \cdots < f^0_{\pi(wh)}. \qquad (1)$$

Будем называть π *упорядочивающей перестановкой*. Следующее утверждение дает характеризацию орбит в терминах образующих ее изображений.

Утверждение 4. *Изображение* F *принадлежит орбите* $\mathrm{Orb}_\Phi(F^0)$ *в том и только том случае, если перестановки, упорядочивающие* F *и* F^0, *совпадают.*

Таким образом, каждая орбита полностью определяется перестановкой π, упорядочивающей элементы изображений по возрастанию. Из этого следует, что существует $(wh)!$ орбит размерности wh. С геометрической точки зрения каждая орбита представляет собой часть wh-мерного единичного куба, все точки которой имеют одинаковую характеристику упорядоченности компонент.

Поскольку все точки каждой орбиты характеризуются одинаковым упорядочением, например, $0 < f_{\pi(1)} < f_{\pi(2)} < \cdots < f_{\pi(wh)} < 1$, то это условие фактически задает систему строгих линейных неравенств. Следовательно, каждая орбита — не только выпуклое, но и открытое полиэдральное множество.

Рассмотрим теперь случай, когда в изображении F^0 имеются равные элементы (т. е. не выполняется Условие 2). Это означает, что в (1) имеются одна или более групп стоящих рядом равных по значению элементов изображения, и поэтому точка, соответствующая этому изображению, лежит на одной из граней многогранника орбиты $\mathrm{Orb}_\Phi(F^0)$. При этом, чем больше количество совпадающих элементов, тем меньше размерность грани. Преобразования из Φ, сохраняя порядок, будут сохранять и равенство соответствующих элементов. Поэтому каждая грань любой размерности также является орбитой при действии группы Φ. Но, в отличие от рассмотренных выше орбит, они имеют меньшую размерность, так что по объемной мере в R^{wh} «граничные» орбиты имеют меру нуль.

Аналогичные рассуждения справедливы и в том случае, когда изображение содержит элементы, равные 0 и 1 (не выполняется Условие 1). Точки, соответствующие таким изображениям, лежат на «внешних» гранях орбиты, лежащих в гранях wh-мерного куба. Поскольку преобразования из Φ обладают свойством $\varphi(0)=0$ и $\varphi(1)=1$, т. е. оставляют точки 0 и 1 неподвижными, то такие изображения тоже образуют орбиты меры нуль.

Таким образом, wh-мерный единичный куб изображений полностью заполняется орбитами всех размерностей — от нулевой до wh, а объем куба (равный 1) равен сумме объемов wh-мерных орбит.

Нетрудно видеть, что упорядочивающая перестановка — это простая перенумерация элементов вектора. Поэтому все wh-мерные орбиты имеют одинаковый wh-мерный объем равный $\frac{1}{(wh)!}$.

Следующее утверждение дает описание системы образующих wh-мерной орбиты Orb_1, которая характеризуется упорядочением $0 < f_1 < f_2 < \cdots < f_{wh} < 1$.

Утверждение 5. *Образующими орбиты* Orb_1 *являются векторы* $F^1 = (1\,1\,\ldots\,1)$, $F^2 = (0\,1\,\ldots\,1)$, $\ldots$, $F^{wh} = (0\,0\,\ldots\,1)$, $F^{wh+1} = (0\,0\,\ldots\,0)$, *т. е.*

$$\mathrm{Orb}_1 = \{\alpha_1 F^1 + \alpha_2 F^2 + \ldots + \alpha_{wh+1} F^{wh+1}\},$$

где $\alpha_1 + \ldots + \alpha_{wh+1} = 1,\ \alpha_i > 0,\ i = 1, \ldots, wh+1$.

Структура множества изображений с общим знаковым представлением

Изучим более подробно структуру множества $\sigma^{-1}(S)$ изображений, имеющих одинаковое знаковое представление. Это множество является объединением орбит, каждая из которых является выпуклым многогранником. Поэтому $\sigma^{-1}(S)$ — также многогранник. Это множество тоже выпуклое, поскольку любое знаковое представление определяет систему линейных неравенств для значений функции яркости $f(i,j)$, а множество решений такой системы — выпуклый многогранник.

Для полного знакового представления S получающееся отношение на $I_w \times I_y$ является отношением линейного порядка (в котором могут быть равные элементы). В этом случае все изображения из $\sigma^{-1}(S)$ имеют одинаковую упорядоченность компонент, следовательно, $\sigma^{-1}(S)$ совпадает с одной из орбит при действии с.м.в.п. Ф. При этом орбита может иметь размерность меньшую, чем wh, если изображение содержит нулевые, единичные или равные значения. Значит, изображение определяется полностью, но с точностью до с.м.в.п. Получить более точное описание изображения в рамках формализма знаковых представлений невозможно.

Если S — оконное знаковое представление, то оно после транзитивного замыкания является отношением частичного порядка. При этом происходит потеря важной информации, что не позволяет установить отношения «больше» или «меньше» между отдельными значениями функции яркости. Поэтому класс изображений, которые могут быть непротиворечиво восстановлены по S значительно шире, т. е. чем больше «уклонение» знакового представления от полного порядка, тем менее точно оно характеризует изображение.

Мера устойчивости полных знаковых представлений

Устойчивость к шумам является важным качеством модели, так как реальные системы имеют дело с изображениями, подвергнутыми искажениям или зашумлениям. Поэтому модель представления должна демонстрировать такую устойчивость, что свойственно системе восприятия человека.

Под мерой устойчивости представления изображения можно понимать функционал, характеризующий «размер» множества изображений с одинаковым представлением. Подобное определение не очень информативно, так как искажения не являются произвольными, а подчиняются закономерностям, продиктованным причинами, вызвавшими эти искажения (например, неидеальностью оптики, тепловыми потоками, атмосферными загрязнениями и т.п.). Один из способов учесть такие искажения — ввести обоснованный вероятностный закон распределения искажений. Ниже, опираясь на приведенные соображения, определяется и исследуется понятие устойчивости знакового представления.

Обозначим через $\hat{F} = F + \tilde{F}$ — изображение, которое получено из исходного изображения F в результате аддитивного зашумления, где $\tilde{F}$ — wh-мерная случайная величина, распределенная по некоторому закону $\mathbb{F}$ с нулевым математическим ожиданием. Понятно, что $\sigma(\hat{F})$ не обязательно будет совпадать с $\sigma(F)$. Пусть $S = \sigma(F)$. Обозначим через $\mathsf{P}_{\mathbb{F}}\{S\} = \mathsf{P}\{\hat{F} \,|\, \sigma(F+\hat{F}) = S\}$ вероятность того, что зашумленное изображение $\hat{F} = F + \tilde{F}$ имеет то же самое знаковое представление S, что и незашумленное изображение F.

Под *мерой устойчивости* $Q_{\mathbb{F}}(S)$ или просто под $\mathbb{F}$-*устойчивостью знакового представления* S будем понимать вероятность того, что произвольное изображение $F \in \sigma^{-1}(S)$ в результате зашумления с законом распределения $\mathbb{F}$ будет иметь то же самое знаковое представление S. $\mathbb{F}$-*устойчивостью модели знакового представления* назовем величину $Q_{\mathbb{F}} = \min\limits_{S\in\mathbb{S}} Q_{\mathbb{F}}(S)$. Таким образом, устойчивость модели в целом не превосходит устойчивости любого из знаковых представлений.

По определению мера устойчивости принимает значения из отрезка $[0, 1]$. При этом нулевая устойчивость будет, например, в случае, если $\sigma^{-1}(S)$ является множеством меры нуль; устойчивость равна единице, если $\mathbb{F}$ — вырожденное распределение, плотность которого равна нулю во всех точках, кроме точки $\mathbf{0}$ (мера Дирака).

Вычисление $\mathbb{F}$-устойчивости полных знаковых представлений

Будем, как и выше, считать, что изображение задается вектором $F = (f_1\, f_2\, \ldots\, f_{wh})$ в wh-мерном единичном кубе $[0, 1]^{wh}$. Как было показано ранее, множество $\sigma^{-1}(S)$ всех изображений, имеющих знаковое представление S, образует орбиту $\mathrm{Orb}_\Phi(F^0)$, где F^0 — произвольное изображение такое, что $\sigma(F^0) = S$, а Φ — группа строго монотонно возрастающих преобразований. Рассмотрим вначале орбиту Orb_1, все точки которой характеризуются тождественной упорядочивающей перестановкой, т. е. $0 < f_1 < f_2 < \cdots < f_{wh} < 1$. Соответствующее знаковое представление обозначим через S_1, т. е. $\sigma^{-1}(S_1) = \mathrm{Orb}_1$.

Пусть $\mathbb{S}^{(wh)} = \{S_1, S_2, \ldots, S_N\}$ — множество всех различных знаковых представлений, которым соответствуют орбиты ненулевой меры. Обозначим через A_{ij} событие, состоящее в том, что некоторое фиксированное изображение F со знаковым представлением S_i в результате зашумления преобразуется в изображение $\hat{F} = F + \tilde{F}$ со знаковым представлением S_j.

Найдем выражение для вероятности $\mathsf{P}\{A_{11}\}$. Учитывая, что $\mathbb{F}\big(\tilde{F}\big) = \mathbb{F}\big(\tilde{f}_1, \tilde{f}_2, \ldots, \tilde{f}_{wh}\big)$ — интегральная функция распределения шума, получим

$$\mathsf{P}\{A_{11}\} = \int_{A_{11}} \frac{\partial^{wh}\mathbb{F}(\tilde{F})}{\partial\tilde{f}_1\partial\tilde{f}_2\cdots\partial\tilde{f}_{wh}} d\tilde{f}_1\, d\tilde{f}_2 \cdots d\tilde{f}_{wh}.$$

Сделаем замену $\tilde{F} = \hat{F} - F$. Нетрудно видеть, что в этом случае областью интегрирования по $\hat{F}$ будет орбита Orb_1. Действительно, условие $\sigma\big(F + \tilde{F}\big) = S_1$ равносильно условию $\sigma\big(\hat{F}\big) = S_1$ или $\hat{F} \in \sigma^{-1}(S_1) = \mathrm{Orb}_1$. Таким образом,

$$\mathsf{P}\{A_{11}\} = \int_{\mathrm{Orb}_1} \frac{\partial^{wh}\mathbb{F}(\hat{F}-F)}{\partial\hat{f}_1\partial\hat{f}_2\cdots\partial\hat{f}_{wh}} d\hat{f}_1\, d\hat{f}_2 \cdots d\hat{f}_{wh}.$$

Пусть теперь $\varphi(F)$ — плотность вероятности появления изображения F из Orb_1. С учетом этого, интегрируя последнее выражение по всей области Orb_1, получаем искомое выражение для устойчивости знакового представления S_1:

$$Q_{\mathbb{F}}(S_1) = \\ = \int_{\mathrm{Orb}_1} \varphi(F)dF \int_{\mathrm{Orb}_1} \frac{\partial^{wh}\mathbb{F}(\hat{F}-F)}{\partial\hat{f}_1\partial\hat{f}_2\ldots\partial\hat{f}_{wh}} d\hat{f}_1 d\hat{f}_2 \cdots d\hat{f}_{wh}.$$

Предположим для определенности, что изображение F выбирается из орбиты Orb_1 по равномерному закону, т. е. $\varphi(F) = \frac{1}{|\mathrm{Orb}_1|}$, если $F \in \mathrm{Orb}_1$; $\varphi(F) = 0$ в противном случае, где $|\mathrm{Orb}_1|$ — объемная мера множества Orb_1. Будем считать, что зашумление функции яркости в каждой точке является независимой одинаково распределенной случайной величиной с плотностью вероятности $\psi(\tilde{f})$. Это естественное предположение, которое делается в большинстве работ, связанных с обработкой изображений. Тогда после несложных преобразований получим:

$$Q_{\mathbb{F}}(S_1) = (wh)! \int_0^1 df_{wh} \int_0^{f_{wh}} df_{wh-1} \cdots \int_0^{f_2} df_1 \times \\ \times \int_0^1 \psi(\hat{f}_{wh} - f_{wh})\, d\hat{f}_{wh} \cdots \int_0^{\hat{f}_2} \psi(\hat{f}_1 - f_1)\, d\hat{f}_1.$$

Следующее простое утверждение дает важное свойство знаковых представлений, соответствующих орбитам ненулевой меры.

Утверждение 6.

$$Q_{\mathbb{F}}(S_1) = Q_{\mathbb{F}}(S_2) = \cdots = Q_{\mathbb{F}}(S_N).$$

Из последнего утверждения вытекает очевидное следствие

Следствие 1. *Для модели полного знакового представления $Q_{\mathbb{F}}(S) = Q_{\mathbb{F}}$ для любого знакового представления S ненулевой меры.*

Иными словами, в случае полного знакового представления понятия $\mathbb{F}$-устойчивости знакового представления и $\mathbb{F}$-устойчивости модели знакового представления эквивалентны.

Гауссовская устойчивость знаковых представлений

Рассмотрим случай зашумления по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и дисперсией σ^2. В этом случае можно говорить о *гауссовской устойчивости*. Мера устойчивости в этом случае имеет вид:

$$Q_G(S_1) = (wh)! \int_0^1 df_{wh} \int_0^{f_{wh}} df_{wh-1} \cdots \int_0^{f_2} df_1 \times \\ \times \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(\hat{f}_{wh}-f_{wh})^2}{2\sigma^2}} d\hat{f}_{wh} \cdots \int_0^{\hat{f}_2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(\hat{f}_1-f_1)^2}{2\sigma^2}} d\hat{f}_1.$$

Для данного интеграла можно получить нижнюю оценку. Пусть $G(x)$ — нормальная функция распределения с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией.

Теорема 7. *Мера гауссовской устойчивости полного знакового представления удовлетворяет неравенству*

$$Q_G(S) > \big(2G(3) - 1\big)^{wh} (1 - 6wh\sigma)^{wh},$$

где $\sigma < \frac{1}{6wh}$.

Полученная оценка справедлива для любого полного знакового представления, для которого $\sigma^{-1}(S)$ имеет ненулевую объемную меру. В этом можно убедиться, сделав замену переменных в соответствии с упорядочивающей перестановкой.

Нижняя оценка для гауссовской устойчивости быстро уменьшается с ростом размера изображения. Это ожидаемый факт, поскольку полное знаковое представление изменится, если хотя бы в одной паре пикселей соотношение яркостей изменится на противоположное. Поэтому вероятность того, что соотношения яркостей всех пар пикселей при зашумлении останутся неизменными, быстро падает с ростом wh.

Аналогично можно найти оценку $Q_G^{Win}(S)$ гауссовской устойчивости и для оконного знакового представления. При этом легко доказывается неравенство $Q_G^{Win}(S) > Q_G(S)$, которое отражает тот факт, что оконное знаковое представление вместе с потерей информации об изображении по сравнению с полным знаковым представлением имеет более высокую устойчивость.

Литература

[1] *Болдин М. В., Симонова Г. И., Тюрин Ю. Н.* Знаковый статистический анализ линейных моделей. — М.: Наука. Физматлит, 1997.

[2] *Jacobs C. E., Finkelstein A., Salesin D. H.* Fast multiresolution image querying // Computer Graphics, 29 (Annual Conference Series), 1995 — Pp. 277–286.

[3] *Гончаров А. В., Каркищенко А. Н.* Влияние освещенности на качество распознавания фронтальных лиц // Изв. ЮФУ. Технические науки. Тематический выпуск «Интеллектуальные САПР». — 2008. №4(81). — С. 82–92.

[4] *Goncharov A., Gubarev V.* Comparison of high-level and low-level face recognition methods // Proc. Pattern recognition and image analysis: new information technologies (PRIA-9-2008), 2008. — Pp. 178–181.

Классификация изображений периодических структур на основе непрерывного преобразования симметрии*

Каркищенко А. Н., Мнухин В. Б.
karkishalex@gmail.com v.mnukhin@gmail.com
Москва, НИИАС

Рассматривается метод классификации изображений повторяющихся структур на плоскости с помощью кристаллографических групп, основанный на использовании непрерывного преобразования симметрии.

Symmetry classification of images of periodic patterns based on continuous symmetry transform*

Karkishchenko A. N., Mnukhin V. B.
IRITAT, Moscow, Russia

A method for classification of images of periodic patterns via crystallographic groups based on the continuous symmetry transform is considered.

Введение

В настоящее время интенсивно развивается область исследований, связанных с изучением свойств симметрии изображений [1]. Такие направления развития информационных технологий, как робототехника, искусственное зрение, методы автоматического и автоматизированного контроля и др., активно стимулируют исследования в этой области. Основываясь на информации о симметрии объекта, можно делать выводы о его структуре даже в том случае, когда некоторые его части отсутствуют [1, 2]. Данные о симметрии объекта позволяют производить сжатие и компактное хранение видеоинформации, осуществлять поиск видеоданных, делать анализ графической информации и др.

В классической математике понятие симметрии — двузначное: объект либо симметричен, либо нет. В реальности симметрия никогда не бывает идеальной, говорить можно только о той или иной *мере симметричности* объекта. Часто группа симметрии объекта на изображении неизвестна, и меру симметрии определяют относительно конкретных осей отражательной или центров вращательной симметрии. Таким образом, традиционные задачи анализа симметрии изображений сводятся к определению параметров симметрии (отражений и/или вращений) с той или иной степенью достоверности. При этом обычно проблема определения полной *группы симметрий* объекта не ставится, что обусловлено большой сложностью этой задачи, особенно для изображений трехмерных объектов.

Вместе с тем задача классификации объектов на изображении по их группам симметрий представляется весьма актуальной для двумерных объектов с периодической структурой. Хорошо известно [3, 4], что несмотря на наличие бесконечного числа периодических структур на плоскости, с каждой из них однозначно ассоциируется одна из 24 *кристаллографических групп*. Эти группы не зависят от размера, поворота, яркости и плотности изображений структуры. Тем самым они являются инвариантами, позволяющими упростить распознавание периодической структуры по ее изображению. Подобные проблемы распознавания естественно возникают в рентгеноструктурном анализе, электронной микроскопии, нанотехнологиях, при анализе аэрофотоснимков, текстурном анализе образов, автоматическом аннотировании изображений, анализе походки человека и животных, и т. п.

Данная работа посвящена рассмотрению метода решения данной проблемы, основанного на использовании *непрерывного преобразования симметрии*, введенного в [5, 6, 7].

Изображения с кристаллографическими группами симметрии

Рассмотрим [3, 4] группы, возникающие при изучении периодических структур на плоскости. Пусть G — некоторая дискретная группа движений плоскости, а F — связная замкнутая область этой плоскости.

Определение 1. *Область F является* фундаментальной *для G, если любая точка плоскости принадлежит орбите некоторой точки (возможно, граничной) области F, но никакие две внутренние точки области не лежат в одной орбите группы G.*

Другими словами, образы фундаментальной области под действием группы G образуют «замощение» плоскости.

Определение 2. *Группа G называется двумерной* кристаллографической группой, *если она имеет ограниченную фундаментальную область.*

Простейшая двумерная кристаллографическая группа, обозначаемая $p1$, порождается сдвигами вдоль

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 08-07-00129 и № 10-07-00478.

двух неколлинеарных осей. Соответствующее разбиение плоскости показано на рис. 1.

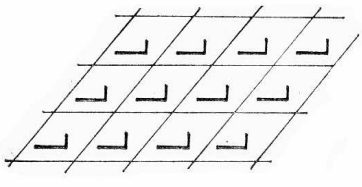


Рис. 1. Фундаментальные области группы $p1$.

Помимо сдвигов, кристаллографические группы могут порождаться отражениями, вращениями и скользящими отражениями (т. е. композициями отражений и сдвигов). Скажем, группа $p3m1$ порождается отражениями относительно трех сторон правильного треугольника, являющегося фундаментальной областью этой группы (см. рис. 2, где фундаментальная область заштрихована).

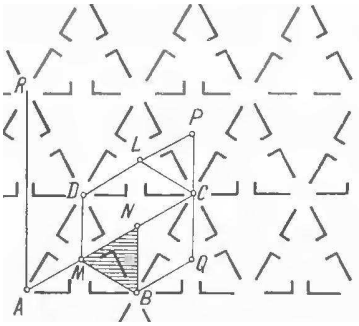


Рис. 2. Кристаллографическая группа $p3m1$.

Поместив внутрь фундаментальной области двумерной кристаллографической группы произвольную асимметричную фигуру, получим под действием группы бесконечную периодическую структуру, обычно называемую *орнаментом* (на рис. 1 и 2 такой фигурой является ⌟). Поэтому двумерные кристаллографические группы иногда называют *группами орнаментов*. Аналогично, рассмотрение плоских структур, бесконечно повторяющихся вдоль одного направления, приводит к *одномерным кристаллографическим группам*, называемых также *группами бордюров*. Доказано [4], что существует только 7 одномерных и 17 двумерных кристаллографических групп. Таким образом, бесконечное множество периодических структур на плоскости естественно распадается на $7 + 17 = 24$ класса.

Несмотря на естественность использования кристаллографических групп как инвариантов изображений периодических структур, число работ, посвященных этому направлению, невелико. В частности, в работе [8] предлагается алгоритм нахождения группы симметрий периодической структуры на основе анализа соотношений между ее образующими.

Одним из источников неопределенности при распознавании симметрии является перспектива, когда изображение объекта претерпевает аффинные преобразования. Например, окружность может превратиться в эллипс, что изменит её симметрию с ортогональной группы $O(2)$ до группы Клейна. Анализ подобных ситуаций приводит к понятию *искаженной симметрии*. В частности, в [9] рассматриваются аффинно-искаженные группы орнаментов и предлагается классифицировать аффинно-трансформированные изображения периодических структур (например, изображения фризов с учетом перспективы) по их наиболее вероятной группе симметрий с учетом соответствующего аффинного преобразования.

Ряд работ посвящен применениям групп бордюров и орнаментов. В работе [10] группы бордюров предлагается использовать для распознавания вращательной симметрии изображения. Классификация групп орнаментов применяется также к задачам текстурного анализа [11], а классификация групп бордюров оказывается полезной при компьютерном анализе походки человека или животных [12].

Наконец, отметим, что отдельной задачей является выделение периодической структуры внутри большего изображения. Подобные задачи (вне связи с классификацией кристаллографических групп) рассматривались в ряде работ. Для их решения предлагается использовать автокорреляционные функции, преобразование Фурье, а также меры периодичности, определяемые на основе так называемых матриц смежностей элементов [1].

Непрерывное преобразование симметрии для определения элементарных ячеек орнаментов

Существующие в настоящее время алгоритмы классификации периодических структур используют применяемый в [8] классический подход: вначале на основе известных методов анализа симметрии изображения последовательно находятся образующие группы, после чего группа определяется на основе анализа соотношений между ними. Недостатком подобного подхода является его малая робастность. Как уже отмечалось, говорить о симметрии реального изображения можно, как правило, только приближенно: образующие определяются с некоторой степенью достоверности, а решением задачи классификации изображения можно считать только некоторое распределение вероятностей на множестве кристаллографических групп. Робастное решение соответствует унимодальному распределению с малой дисперсией. Однако последовательное нахождение образующих независимо друг

от друга сглаживает распределение, делая решение менее надежным.

Предлагаемый подход к решению задачи классификации периодических структур свободен от указанного недостатка. Он основан на дальнейшем развитии метода непрерывного преобразовании симметрии, предложенного в работах [5, 6, 7].

Суть подхода состоит во введении на множестве возможных фундаментальных областей изображения интегральной меры согласованности данной области с некоторой кристаллографической группой. Для построения такой меры на множестве точек изображения вначале вводится векторная функция признаков, на основе которой определяется монотонная и нормированная мера симметричности точек изображения. Затем мера симметричности на точках с помощью непрерывного интегрального преобразования продолжается на всю область. В результате такого преобразования область изображения отображается в фазовое пространство образующих группы (трансляций, отражений, вращений). После этого решение задачи классификации сводится к исследованию экстремальных свойств полученного отображения.

Введем определения. Под *изображением* I в некоторой области X действительной плоскости $\mathbb{R}^2$ будем понимать неотрицательную ограниченную функцию $I(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} = (x, y) \in X$. *Функцией признаков* называется векторная функция $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x})$, ставящая в соответствие точкам $\mathbf{x} \in X$ вектор признаков $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}) = (\omega_1(\mathbf{x}), \ldots, \omega_n(\mathbf{x}))$, где $\omega_i(\mathbf{x})$ — некоторые инвариантные характеристики изображения в окрестности точки $\mathbf{x}$.

Мерой сходства точек изображения I называется функция $\mu\colon X \times X \to [0, 1]$, удовлетворяющая следующим условиям:

1) *монотонное убывание* по расстоянию:
для любых точек $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$, $\mathbf{x}_3$, $\mathbf{x}_4$,
$$\big\|\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_1) - \boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_2)\big\| > \big\|\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_3) - \boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_4)\big\| \Rightarrow \mu(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) < \mu(\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4)\ ;$$
2) *нормированность*:
если $\big\|\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_1) - \boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_2)\big\| = 0$, то $\mu(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 1$;
3) *доопределение на* $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$:
если $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \notin X \times X$, то $\mu(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 0$.

Конкретный выбор меры сходства связан со спецификой задачи. Скажем, в качестве меры сходства можно выбрать функцию
$$\mu(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \Big(1 + \big\|\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_1) - \boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}_2)\big\|^2\Big)^{-1}.$$

Далее для простоты будем считать, что изображение I периодической структуры определено во всей плоскости $\mathbb{R}^2$. Если $D \subset \mathbb{R}^2$ — некоторая ограниченная область, то ограничение функции I на D является фрагментом изображения.

Пусть g — некоторая симметрия (сдвиг, отражение, вращение) плоскости. Под *непрерывным преобразованием симметрии* по области D будем понимать преобразование вида
$$S_D(g) = \frac{1}{m(D)} \iint_D \mu(\mathbf{x}, g\mathbf{x})\, d\mathbf{x},$$
где $m(D)$ — мера области D, под которой для простоты будем понимать ее площадь. Из неотрицательности и нормированности меры сходства μ следует, что $0 \leqslant S_D(g) \leqslant 1$. Величина $S_D(g)$ показывает степень «согласованности» области D с симметрией g. Если g имеет конечный порядок n (т. е. является отражением или вращением на угол $2\pi/n$), то в [5, 6, 7] вводятся меры согласованности области изображения с циклической группой $C_n = \langle g \rangle$. Заметим, что вводимые там меры не применимы в случае бесконечных групп.

Предположим, что I является изображением периодической структуры, соответствующей двумерной кристаллографической группе G. Пусть H — абелева подгруппа в G, порожденная всеми сдвигами из G. Известно [4], что H порождается ровно двумя неколлинеарными сдвигами t_1 и t_2 и имеет тип $p1$. Поэтому фундаментальная область Φ подгруппы H является параллелограммом, называемым *элементарной ячейкой* группы G. (Например, в качестве элементарной ячейки на рис. 2 можно взять параллелограмм $ABCD$. В общем случае в качестве Φ можно взять любой параллелограмм с вершинами $\mathbf{x}_0$, $t_1(\mathbf{x}_0)$, $t_2(\mathbf{x}_0)$, $t_1t_2(\mathbf{x}_0)$, где $\mathbf{x}_0$ — произвольная точка плоскости.) Внутри Φ фундаментальная область группы G повторяется $|G/H|$ раз. Поэтому проблему классификации орнамента естественно начинать с поиска элементарной ячейки Φ. Покажем, что эта задача сводится к проблеме нахождения экстремума некоторой функции.

Обозначим через $t_{\mathbf{a}}$ сдвиг плоскости на произвольный вектор $\mathbf{a}$: $t_{\mathbf{a}}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} + \mathbf{a}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$. Пусть $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$ — два произвольных неколлинеарных вектора. Зафиксируем некоторую точку $\mathbf{x}_0$ и обозначим через $D(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = D_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ параллелограмм с вершинами в точках $\mathbf{x}_0$, $\mathbf{x}_0+\mathbf{u}$, $\mathbf{x}_0+\mathbf{v}$, $\mathbf{x}_0+\mathbf{v}+\mathbf{u}$. (Заметим, что его площадь равна модулю векторного произведения $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$, т. е. $m(D) = |[\mathbf{u}, \mathbf{v}]|$.) Теперь на множестве $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ рассмотрим функцию
$$f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \inf_n \left\{ \frac{1}{(2n+1)^2} \sum_{k,\, l=-n}^{n} S\Big(D(\mathbf{u}, \mathbf{v}),\ t_{\mathbf{u}}^k t_{\mathbf{v}}^l\Big) \right\},$$
где n пробегает множество целых положительных чисел. Очевидно, что $0 \leqslant f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \leqslant 1$. Учитывая связь между D и векторами $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$, можем также считать, что функция f определена на всевозможных параллелограммах $D = D(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ и писать $f = f(D)$. Заметим, что f является мерой сходства

«в среднем» фрагмента изображения в D с изображениями в окружающих D параллелограммах. Как нетрудно доказать, справедлива следующая

Теорема 1. *Наименьший по площади параллелограмм $D = D(\mathbf{u}, \mathbf{v})$, на котором функция f достигает значения* 1*, является элементарной ячейкой* Φ *двумерной кристаллографической группы G:*

$$\Phi = \arg\min_{D}\{m(D) \ : \ f(D) = 1\}.$$

Соответствующие сдвиги $t_{\mathbf{u}}$ и $t_{\mathbf{v}}$ порождают H.

Аналогичный подход может быть использован для выделения фундаментальных областей.

Практическое определение фундаментальной области

Как уже отмечалось, реальные изображения задаются на ограниченной области $X \subset \mathbb{R}^2$, как правило, представляющей собой прямоугольник. Очевидно, что при практическом использовании Теоремы 1 точку x_0 следует выбирать вблизи геометрического центра изображения периодической структуры, а само это изображение следует доопределить на всей плоскости $\mathbb{R}^2$. Это можно сделать, например, следующим образом. Пусть область $D^* = \bigcup\limits_{|k|,\,|l|\leqslant n_0} D_{t_{\mathbf{u}}^k t_{\mathbf{v}}^l(x_0)}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ представляет собой объединение $(2n_0 + 1)^2$ параллелограммов, получающихся из D сдвигами и максимально заполняющих исходную область X. Доопределим изображение на всей плоскости за пределами области D^*, положив, что на любом параллелограмме $D_{t_{\mathbf{u}}^k t_{\mathbf{v}}^l(x_0)}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$, где $|k|,\, |l| > n_0$, оно совпадает с изображением на D. Очевидно, что для $|k|,\, |l| > n_0$ выполняется равенство $S(D,\, t_{\mathbf{u}}^k t_{\mathbf{v}}^l) = 1$. Теперь нетрудно показать, что для всех $n > n_0$ справедливо неравенство

$$\frac{1}{(2n+1)^2}\sum_{|k|,\,|l|\leqslant n} S\Big(D(\mathbf{u}, \mathbf{v}),\ t_{\mathbf{u}}^k t_{\mathbf{v}}^l\Big) > \frac{1}{(2n_0+1)^2}\sum_{|k|,\,|l|\leqslant n_0} S\Big(D(\mathbf{u}, \mathbf{v}),\ t_{\mathbf{u}}^k t_{\mathbf{v}}^l\Big),$$

откуда следует, что

$$f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \min_{n\leqslant n_0}\left\{\frac{1}{(2n+1)^2}\sum_{|k|,|l|\leqslant n} S\Big((\mathbf{u}, \mathbf{v}),\ t_{\mathbf{u}}^k t_{\mathbf{v}}^l\Big)\right\}.$$

Таким образом, практическая задача построения элементарной ячейки орнамента сводится к задаче нахождения экстремумов функции f четырех действительных переменных (координат векторов $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$) при ограниченной вариации параметра n. Для ее решения можно воспользоваться одним из стандартных методов, например, методом градиентного спуска. При этом границы изменения параметра n определяются размерами изображения и векторами $\mathbf{u}$ и $\mathbf{v}$. Выбор их начальных приближений $\mathbf{u}_0$ и $\mathbf{v}_0$ оказывает большое влияние на скорость сходимости метода. Для оптимального выбора $\mathbf{u}_0$ и $\mathbf{v}_0$ целесообразно использовать дополнительную информацию об изображении I, получаемую, например, на основе анализа автокорреляционной функции, преобразования Фурье, вейвлет-анализа, и т. п.

Выводы

Показано, как непрерывное преобразование симметрии может быть использовано для решения задачи выделения элементарной ячейки изображения периодической структуры на плоскости с целью определения соответствующей этой структуре двумерной кристаллографической группы.

Литература

[1] *Gool L., Moons T., Ungureanu D., Pauwels E.* Symmetry from Shape and Shape from Symmetry // Int. J. Robotics Res., 14 (5), 1995 — P. 407–424.

[2] *Mnukhin V. B.* The reconstruction of oriented necklaces // Journal of Combinatorics, Information and System Sciences. — 1995. — V. 20. — P. 261–272.

[3] *Никулин В. В., Шафаревич И. Р.* Геометрии и группы — М.: Наука, 1983. — 239 с.

[4] *Gallian J. A.* Contemporary Abstract Algebra — 2002. — 426 p.

[5] *Gorban A. S., Karkishchenko A. N.* Detection of symmetry of images based on similarity measures of sets // Proc. 9th Int. Conf. «Pattern Recognition and Image Analysis», Nizhni Novgorod, 2008. — P. 261–264.

[6] *Горбань А. С., Каркищенко А. Н.* Инвариантные характеристики в задачах обнаружения симметрии изображений // САИТ-2007, М.: Изд-во ЛКИ, 2007. — P. 210–212.

[7] *Горбань А. С., Каркищенко А. Н.* К определению мер сходства полутоновых изображений // Известия ЮФУ. — 2008. — №4. — P. 98–103.

[8] *Liu Y., Collins R. T., Tsin Y.* A computational model for periodic pattern perception based on frieze and wallpaper groups // Trans. Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2004. — 26(3) — P. 354–371.

[9] *Liu Y., Collins R. T.* Periodic pattern analysis under affine distortions using wallpaper groups // AFPAC 2000. — P. 241–250.

[10] *Lee S. K., Collins R. T., Liu Y. X.* Rotation symmetry group detection via frequency analysis of frieze-expansions // Proc. IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. – 2008. — P. 1–8.

[11] *Liu Y., Lin W., Hays J.* Near-regular texture analysis and manipulation // ACM Trans. Graph. — 2008. — V. 23(3) — P. 368–376.

[12] *Liu Y., Collins R. T., Tsin Y.* Gait Sequence Analysis Using Frieze Patterns // ECCV, 2002. — V. 2. — P. 657–671.

Метод обнаружения водяных знаков, основанных на визуально незаметном искажении текстур*

Митекин В. А., Федосеев В. А.
mitekin@smr.ru, vicanfed@smr.ru
Самара, Учреждение Российской академии наук Институт систем обработки изображений РАН

В работе предлагается метод обнаружения текстурных водяных знаков, встроенных в печатные изделия. Представлена математическая модель стеганографического встраивания в печатные образцы, формально описана процедура встраивания для широкого класса методов и его модификаций. Построен и обучен на реальных образцах линейный классификатор, предназначенный для обнаружения водяных знаков.

A detection method for imperceptible texture distortion-based watermarks*

Mitekin V. A., Fedoseev V. A.
Institution of Russian Academy of Sciences, Image Processing Systems Institute of RAS, Samara, Russia

In the paper, a method for detecting textural watermarks embedded in printed documents is proposed. A novel mathematical model of steganographic embeddings based on human vision model is presented. For a wide class of steganographic methods, an embedding procedure and its modifications are described. A linear classifier for detecting the watermarks is constructed.

Введение

Защита документов от подделки и копирования и анализ подлинности таких документов являются массовыми задачами, возникающими повсеместно в различных областях человеческой деятельности. В последние десятилетия все более широкое распространение цифровых печатных устройств привело к появлению значительного числа вычислительных методов, предназначенных для защиты от подделки и копирования специальной печатной продукции (ценных бумаг, удостоверений личности и т. д.), воспроизводимой с использованием таких устройств. В частности, широкое распространение получили способы защиты печатной продукции от подделки и копирования, предполагающие встраивание в печатную продукцию защитной информации путем визуально неразличимого искажения фоновой текстуры цифровых изображений, выводимых на печать. Такую защитную информацию далее будем называть текстурными водяными знаками (а также ТВЗ или текстурными ВЗ).

Основным достоинством подхода, основанного на встраивании ТВЗ, является тот факт, что для защиты печатного изделия не требуется применения специализированных аппаратных комплексов и расходных материалов. В дальнейшем внесенные в печатное изделие искажения могут быть обнаружены специализированным детектором и использованы при выявлении подделки или копирования печатного изделия.

Настоящая работа посвящена разработке и экспериментальному исследованию метода стегоанализа, позволяющего обнаруживать защитную информацию, встроенную путем визуально неразличимого искажения фоновой текстуры цифровых изображений, выводимых на печать.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-01-00511-а.

Математическая модель стеганографического встраивания в печатные изделия

Как показано в [1], встраивание защитной информации может быть представлено как модификация «наименее значимых» отсчетов контейнера. Для цифровых изображений такими наименее значимыми отсчетами являются либо младшие биты значения яркости пикселя (при встраивании в пространственной области), либо коэффициенты какого-либо дискретного преобразования, соответствующие наименее визуально значимым, в рамках модели человеческого зрения, частотам.

В данном разделе представлена аналогичная модель, построенная с учетом специфики встраивания ТВЗ в печатные изделия, заключающейся в том, что каналом передачи данных является физический объект — печатное изделие, обладающее таким свойством, как фиксированный линейный размер точки при выводе на печать, равный d_{point}.

Способность человеческого зрения различать контрастные объекты на однородном фоне зависит главным образом от угловых размеров данных объектов и от соотношения яркостей объекта и фона. Экспериментально полученная функция CSF (Contrast Sensitivity function, [1–3]) показывает, как изменяется визуально воспринимаемый контраст объекта и фона в зависимости от углового размера объекта. На рис. 1 приведен пример экспериментально полученной в [3] зависимости безразмерной величины *Contrast Sensitivity* от углового размера объекта (угловой частоты r).

Существует ряд аналитических приближений функции CSF, например, представленное в [2] аналитическое приближение

$$\mathrm{CSF}(r) = 0{,}2r\, e^{-0{,}18r}, \quad r = 1/\arctan(d/L),$$

где d — линейный размер объекта (в случае, если объектом является пиксель изображения, выведенного на печатное устройство, $d = d_{\mathrm{point}}$), L — расстояние, с которого объект наблюдается.

Таким образом, если величины d_{point}, контраст C печатаемого документа и расстояние L, с которого печатное изделие будет наблюдаться, известны, то возможно оценить минимальный размер d_{pix} отличимого от фона элемента цифрового изображения, выводимого на устройство печати, как

$$d_{\mathrm{pix}} = \frac{L\tan(1/r_{\max})}{d_{\mathrm{point}}}, \qquad (1)$$

где $r_{\max}$ может быть найдено из равенства

$$\mathrm{CSF}(r_{\max}) = 1/C.$$

На этапе стегоанализа, когда в наличии имеется лишь отсканированный печатный образец и отсутствует его изначальное цифровое представление, величину d_{pix} можно оценить из других соображений:

$$d_{\mathrm{pix}} = \frac{\mathrm{DPI}}{\mathrm{LPI}},$$

где DPI — известное разрешение сканирующего устройства, а LPI — линиатура растра [4], являющаяся одной из основных характеристик печати и равная количеству линий растра на единицу длины изображения.

В 2003 году Ассоциацией специальной графической печати (Specialty Graphic Imaging Association, SGIA) было рекомендовано правило выбора значения линиатуры в зависимости от требуемого качества и назначения печатаемого образца, получившее название «Правило 240» [5]:

$$\mathrm{LPI} = \frac{240}{L_{[\mathrm{feet}]}},$$

где литерой L, как и прежде, обозначается расстояние от глаза наблюдателя до печатного образца, выраженное в футах. Это правило позволяет вычислить d_{pix} как

$$d_{\mathrm{pix}} = \frac{\mathrm{DPI}\cdot L_{[\mathrm{feet}]}}{240}.$$

На основе приведённых соображений сформулируем математическую модель представления изображения-контейнера в двухкомпонентной форме. Контейнер $I\,[N_1 \times N_2]$, предназначенный для встраивания ТВЗ и последующего вывода на печать, представляет собой сумму двух

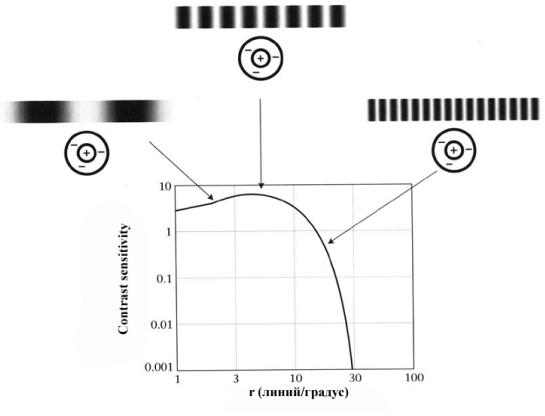


Рис. 1. График CSF.

независимых, разделимых в частотной области компонент: $I_{\mathrm{low}}\,[N_1 \times N_2]$ (визуально значимая) и $I_{\mathrm{high}}\,[N_1 \times N_2]$ (визуально избыточная). Компоненты I_{low} и I_{high} могут быть получены из исходного изображения I путем применения низкочастотного фильтра, полоса пропускания которого ограничена частотами среза $\omega_1 = N_1/d_{\mathrm{pix}}$ и $\omega_2 = N_2/d_{\mathrm{pix}}$, где d_{pix} вычисляется согласно (1).

Общий принцип встраивания визуально неразличимого ТВЗ в рамках представленной модели может быть сформулирован следующим образом: встраивание должно производиться только путем модификации визуально избыточной компоненты I_{high} и не должно приводить к значительному искажению визуально значимой компоненты I_{low} контейнера. В качестве количественной оценки искажений, вносимых в визуально значимую компоненту изображения, применяется нормированное среднеквадратичное отклонение (NMSE) либо аналогичные количественные меры искажения [1, 3].

Метод встраивания ТВЗ

Согласно [6], к настоящему времени разработано более 40 методов встраивания текстурных ВЗ в печатные изделия различных типов. В настоящей работе рассматривается наиболее широкий класс запатентованных методов встраивания ТВЗ, подробно описанных в [7]. Коротко суть его заключается в замощении однородных областей изображения-контейнера двумя различными текстурами, имеющими некоторые близкие признаки, обеспечивающие их визуальную неразличимость друг от друга.

Ниже представлено формальное описание процедуры встраивания ТВЗ различными алгоритмами данного класса в рамках описанной выше обобщённой модели встраивания защитной информации.

Входными данными являются контейнер I размерами $[N_1 \times N_2]$, ТВЗ $W\,[N_1' \times N_2']$, где $N_1' = N_1/d_{\mathrm{pix}}$, $N_2' = N_2/d_{\mathrm{pix}}$, а d_{pix} рассчитывается

по формуле (1). Контейнер I разбивается на непересекающиеся блоки I_{mn} размером $d_{\text{pix}} \times d_{\text{pix}}$. Встраивание ТВЗ осуществляется поблочно:

$$I'_{mn} = \begin{cases} P_0(\bar{I}_{mn}) \in \hat{P}_0 & \text{если } W(m,n) = \text{black}; \\ P_1(\bar{I}_{mn}) \in \hat{P}_1 & \text{если } W(m,n) = \text{white}, \end{cases}$$

где $P_0(\bar{I}_{mn})$ и $P_1(\bar{I}_{mn})$ — синтезируемые бинарные шаблоны, размер которых и средняя яркость равны соответственно размеру и средней яркости фрагмента I_{mn}. При этом должно выполняться условие

$$\left|\bar{I}_{mn} - \bar{P}_0(\bar{I}_{mn})\right| < \Delta \wedge \left|\bar{I}_{mn} - \bar{P}_1(\bar{I}_{mn})\right| < \Delta,$$

где $\bar{P}_1(\bar{I}_{mn})$ и $\bar{P}_0(\bar{I}_{mn})$ — средние яркости шаблонов $P_0(\bar{I}_{mn})$ и $P_1(\bar{I}_{mn})$, а Δ — задаваемая пользователем или вычисляемая экспериментально количественная оценка максимального допустимого искажения контейнера при встраивании ТВЗ.

Помимо этого $P_0(\bar{I}_{mn})$ и $P_1(\bar{I}_{mn})$ должны удовлетворять дополнительным условиям, уникальным для каждого из алгоритмов рассматриваемого класса. Например, в методе, описанном в US Patent 7006256 [7] (рис. 2 a), используется условие

$$\begin{cases} \text{DF}\big(P_0(\bar{I}_{mn})\big) = \alpha_0; \\ \text{DF}\big(P_1(\bar{I}_{mn})\big) = \alpha_1; \\ |\alpha_0 - \alpha_1| > \delta_1, \end{cases}$$

где $DF(\cdot)$ — среднее значение локального поля направлений [10] для выбранных шаблонов. А в методе из US Patent 6268866 [7] (рис. 2 b)

$$\rho\big(P_0(\bar{I}_{mn}), P_1(\bar{I}_{mn})\big) < \delta_2,$$

где $\rho\big(P_0(\bar{I}_{mn}), P_1(\bar{I}_{mn})\big)$ — коэффициент корреляции между бинарными шаблонами. Величины δ_1 и δ_2 являются параметрами методов встраивания.

Для всех представленных алгоритмов методом извлечения ТВЗ является коррелятор [8] с известными при встраивании шаблонами текстур $\hat{P}_0$, $\hat{P}_1$, которые, таким образом, являются секретным ключом, необходимым для извлечения ТВЗ. Далее в работе будет представлен метод обнаружения ТВЗ, не требующий знания этих шаблонов, то есть метод стегоанализа для рассмотренного класса алгоритмов.

Метод обнаружения ТВЗ

Разработанный метод выделения текстурных водяных знаков состоит из двух этапов. На первом этапе происходит отыскание текстурных шаблонов P_i, $i = 1, \ldots, K$, присутствующих на изображении с ВЗ. В литературе описано множество решений этой задачи. К примеру, можно воспользоваться методом текстурного анализа с использованием фильтров Габора [11].

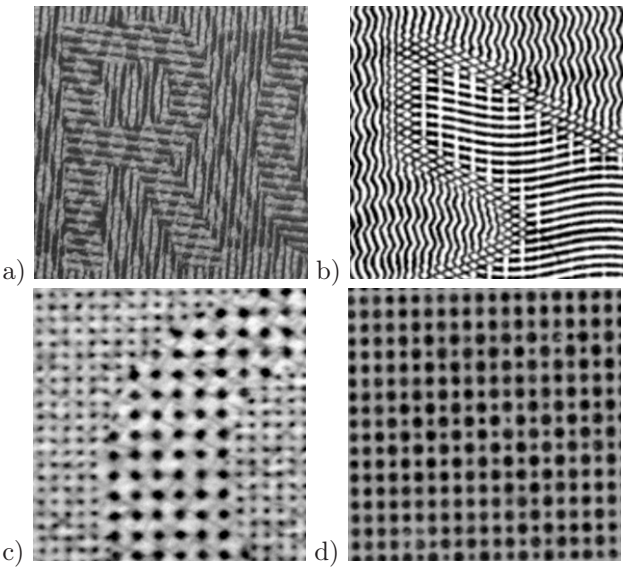


Рис. 2. Примеры изображений с ТВЗ (масштаб 10:1).

Далее для каждой пары извлечённых шаблонов P_i, P_j, $i \neq j$ необходимо осуществить проверку на наличие ТВЗ, встроенного с использованием этих шаблонов, путём оценки величины

$$Q(P_i, P_j) = \frac{\text{NMSE}(P_{i,\text{low}}, P_{j,\text{low}})}{\text{NMSE}(P_i, P_j)}, \qquad (2)$$

где $P_{i,\text{low}}$ — визуально значимые компоненты каждого из шаблонов. Шаблоны текстур, предназначенные для встраивания текстурного ВЗ, должны обеспечивать значение меры Q заведомо меньшее, чем шаблоны текстур, не предназначенные для встраивания ТВЗ.

Построение классификатора для обнаружения встроенного ТВЗ

В ходе экспериментальных исследований был построен и обучен линейный классификатор, использующий значение меры Q для обнаружения ТВЗ. Обучающая и контрольная выборки состояли из 80 изображений-контейнеров, полученных путем имитационного моделирования информационного тракта системы формирования печатного изображения, описанной в [8]. В половину из них встраивались различные ТВЗ при помощи четырёх алгоритмов исследуемого класса методов встраивания, проиллюстрированных на рис. 2. В другую половину изображений встраивание не производилось.

Далее, для всех изображений из обучающей выборки отыскивались пары шаблонов текстур, предположительно использовавшихся для встраивания текстурного ВЗ. Примеры найденных пар шаблонов текстур приведены на рис. 3. Затем для каждого из изображений вычислялось значение меры Q. Эти значения пополняли гистограмму выборочного распределения Q для классов изображений с ТВЗ и без ТВЗ. Полученная гистограмма представлена

на рис. 4, а выборочные характеристики двух распределений — в таблице:

Класс	$M(Q)$	$D(Q)$
X_0: нет ТВЗ	1,023	0,029
X_1: есть ТВЗ	0,211	0,016

При решении задачи обнаружения ТВЗ приоритетной является минимизация пропусков информации. В результате классификации по скалярному признаку Q для классов X_0 и X_1 с использованием критерия Неймана–Пирсона [9] был выбран порог, равный 0,595. Доля ошибок первого рода составила 2,5%, второго рода — 7,5%.

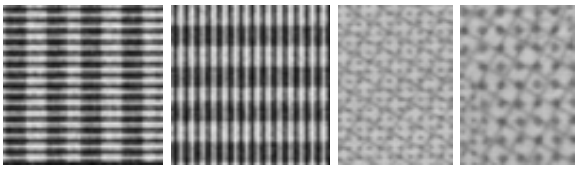


Рис. 3. Примеры найденных пар шаблонов текстур.

Полученные результаты позволяют судить о том, что эффективность разработанного классификатора при обнаружении ТВЗ заданных классов является достаточной для практического применения в задачах стегоанализа и для оценки надежности методов встраивания ТВЗ в печатные изделия.

Извлечение ТВЗ по результатам обнаружения

При помощи разработанного метода обнаружения был проведён эксперимент по извлечению ТВЗ из реальных отсканированных образцов печатной продукции. В качестве метода извлечения использовался коррелятор с найденными шаблонами текстур, для которых рассчитанное значение показателя Q (2) отнесено к классу изображений с ТВЗ. Результаты извлечения представлены на рис. 5.

Заключение

В работе предложен двухэтапный метод обнаружения текстурных водяных знаков, разработанный с учётом представленной в работе математической модели стеганографического встраивания в печатные изделия. Построен линейный классификатор, предназначенный для обнаружения ТВЗ.

Литература

[1] *Barni M.* Watermarking Systems Engineering. — CRC Press, 2004.

[2] *Ohta N., Rosen M.* Color desktop printer technology. — CRC Press, 2006.

[3] *Wang Z., Bovik A.* Modern Image Quality Assessment. — Morgan & Claypool Publishers, 2006.

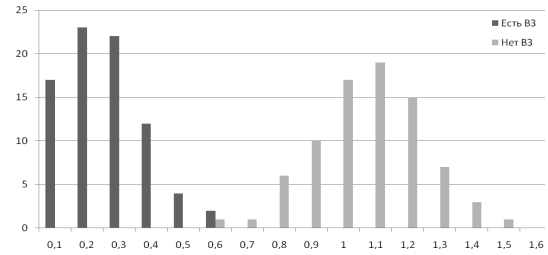


Рис. 4. Гистограмма выборочного распределения Q для двух классов изображений.

Рис. 5. Примеры извлечения ТВЗ.

[4] *Lau D O., Arce G R.* Modern digital halftoning. — NY: Marcel Dekker Inc., 2001.

[5] *Waite J. J., Oliver G. R.* Viewing Distance as a Variable in Discerning Grayscale Halftone Dots at Varying Screen Frequencies // J. of Industrial Technology Postings. — 2006. — Vol. 22, No. 2. — Pp. 1–9.

[6] *Saarelma H.* Printed Codes – Patent Survey. Graphic Arts in Finland. — 2005. — No. 34. — Pp. 1–11.

[7] *Митекин В. А., Сергеев А. В., Федосеев В. А., Богомолов Д. М.* Построение модели стеганографической системы и обобщенного алгоритма встраивания ЦВЗ в полиграфические изделия // Компьютерная оптика. — 2007. — Т. 31, №. 4. — С. 95–100.

[8] *Глумов Н. И., Митекин В. А., Сергеев А. В., Федосеев В. А., Богомолов Д. М.* Алгоритм извлечения скрытой информации из отсканированных полиграфических изделий // Вестник СГАУ. — 2008. — Т. 2(15). — С. 216–220.

[9] *Soifer V. A. et al.* Computer Image Processing, Part I: Basic concepts and theory. — VDM Verlag, 2009.

[10] *Soifer V. A. et al.* Computer Image Processing, Part II: Methods and algorithms. — VDM Verlag, 2009.

[11] *Jain A. K., Farrokhnia F.* Unsupervised texture segmentation using Gabor filters // Pattern Recognition. — 1991. — Vol. 24, No. 12. — Pp. 1167–1186.

Модифицированный метод геометризованных гистограмм и его применение*

Кий К. И.
kikip_46@mail.ru
Москва, Институт Прикладной Математики им. Келдыша РАН

В работе предлагаются усовершенствования метода геометризованных гистограмм. Эти усовершенствования позволяют более точно учесть роль полутоновой компоненты изображения. В работе также обсуждаются применения метода для поиска ориентиров и для разработки интеллектуального детектора характерных черт (salient features) изображений.

The modified geometrized-histograms method and its application*

Kiy K. I.
Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow, Russia

In this paper, modifications to the geometrized-histograms method are proposed. These modifications make it possible to take into account more precisely the role of the grayscale component of the image. In this paper, we also discuss the application of the method to finding landmarks and to developing a new intelligent image detector for finding salient features in the image.

Имеются три примыкающих друг к другу области исследований в компьютерном зрении: сегментация цветных изображений, понимаемая как индексация изображений (разбиение исходного изображения на однородные области, имеющие разные цветовые характеристики, см. [1, 2, 3]), поиск характерных признаков изображений (salient features) [4], и активная сегментация [5], приводящая к выделению важных в некотором смысле объектов и подкрепляемая в дальнейшем их детальным анализом с использованием других средств компьютерного зрения. Если в первой области в основном занимаются формированием новых изображений, с редуцированным числом цветов с сохранением субъективного подобия изображений, то третья область в основном ориентирована на применение в робототехнике и имеет целью создать модель среды мобильного робота для решения интеллектуальных задач, например на создание робота-ассистента [5]. Вторая область ориентирована на создание некоторого начального приближения к модели среды на изображении как для первой области, так и для третьей. В ней делаются попытки выделения областей интереса.

Метод геометризованных гистограмм [7, 8, 9, 10, 11], предложенный автором, обещает продвижение в каждой из этих трех областей, причем обеспечивая работу в реальном времени с привлечением семантики на ранних стадиях решения задач. Метод также предлагает технику для автоматической интерпретации полученных результатов в терминах, понятных человеку. Для сравнения, автоматическая интерпретации в первом подходе практически не затрагивается. Что касается выделения характерных признаков, то с помощью предложенного метода удается устанавливать структурные связи между ними. Это позволяет формализовать понятие «заметный объект» и обеспечивает выделение объектов малого размера на фоне, мало отличающемся от объекта.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-07-00612а.

Метод геометризованных гистограмм и его модификации

Основные идеи и конструкции данного метода были опубликованы в [6, 7, 8, 9, 10, 11]. Последняя работа содержит замкнутое изложение метода, для состояния, в котором была разработка до данной работы.

Метод геометризованных гистограмм предлагает решение задачи математического описания цветного изображения в векторном виде таком, что задачи обработки изображений, такие как сегментация, поиск характерных признаков, выделение объектов, вербальное описание, могут быть формализованы в терминах введенных структур. Векторное описание получается в виде расслоения (топологической структуры) и ряда других структур на нем [11]. Оно основано на понятии геометризованной гистограммы узкой полосы изображения, которая объединяет статистическое описание с описанием геометрии распределения значений характеристик изображения. Актуальность построения такого слияния неоднократно подчеркивалась [2]. При проектировании точек полосы на ось Ax (которой параллельна полоса), множества уровня функции, задающей изображение, проектируются на системы интервалов на этой оси. Данные системы интервалов описывают геометрию распределения значений функции изображения вдоль оси Ax и порождают геометризованную гистограмму полосы. Глобальное векторное описание получается с по-

мощью разбиения изображения на узкие полосы, параллельные оси Ax, и объединения локальных геометризованных гистограмм полос в один объект [11]. Глобальная геометризованная гистограмма есть тройка $\pi\colon \mathrm{GH} \to B$, где π — отображение проектирования и B — дискретное упорядоченное множество, параметризующее полосы разбиения. Пространство GH есть расслоенное пространство, каждый слой которого локальные геометризованные гистограммы полос изображения GH_s, $s \in B$. GH_s есть некоторое подпространство пространства всех конечных интервалов оси Ax. Каждому интервалу $I \in \mathrm{GH}_s$ поставлен в соответствие следующий набор характеристик [10, 11]:

$$(\mathrm{cf}, H_{\min}, H_{\max}, H_{\mathrm{mean}}, S_{\min}, S_{\max}, S_{\mathrm{mean}}, \mathrm{gr}_{\min}, \mathrm{gr}_{\max}, \mathrm{gr}_{\mathrm{mean}}, \mathrm{card}, \mathrm{beg}, \mathrm{end}),$$

где cf — фиксированное значение функции CF, построенной на основе функции $G/(G+B)$, в значениях которой устраиваются искусственные разрывы и вводятся дополнительные значения, чтобы разделить цветовые диапазоны [9, 11]; R, G, B — стандартные цветовые координаты); константы $H_{\min}$, $H_{\max}$, H_{mean}, $S_{\min}$, $S_{\max}$, S_{mean}, $\mathrm{gr}_{\min}$, $\mathrm{gr}_{\max}$, $\mathrm{gr}_{\mathrm{mean}}$ описывают диапазон и среднее значение оттенка, насыщения и полутоновой компоненты изображения соответственно; card, beg и end задают мощность интервала (число точек в прообразе в полосе) и координаты начала и конца интервала на оси Ax.

В настоящей работе предлагается модификация векторного описания, продолжающая [10], которая позволяет в большей степени учесть влияние полутоновой компоненты и улучшить его работу для сцен, значительная часть объектов которых неокрашена (имеют нулевое или близкое к нему насыщение цвета). Например, такими могут быть уличные сцены.

Вопросам восстановления естественного цвета объекта на изображении посвящены много статей (см. работу [13] и ссылки в ней). Однако в статьях этого направления как правило анализируются простые сцены с малым числом предметов, но при сложном освещении.

Нами разработана система определения цвета отрезков геометризованной гистограммы с малым цветовым насыщением, оформленная в виде набора продукций, которая в зависимости от цветовых и полутоновых характеристик приписывает им некоторый наивный цвет (белый, ряд оттенков серого или черный). В том числе существенным вопросом является определение цветов темных отрезков. Это необходимо с двух точек зрения. Во-первых при построении объектов методами из [9, 11] бывает так, что затененные части, примыкающие к реальным объектам, имеют те же самые оттенок и насыщение, что и эти объекты, и присоединяются к ним. Во-вторых, в темных объектах может иметь факт сильно разрывного поведения цветовых характеристик (оттенка и насыщения). Этот факт, однако, игнорируется человеческим зрением, и мы видим однородно окрашенный объект.

Для того чтобы учесть эффекты темных мест производится дополнительная модификация функции CF. Для каждого цветового диапазона и насыщения вводится верхняя граница темноты (определенное значение полутоновой компоненты), при котором отрезок есть кандидат на приписывание ему черного цвета. Известно, что вклад цветовых компонент в полутоновую составляющую различен, поэтому нельзя выбрать единую границу. Каждый диапазон темноты разделяется на несколько градаций. К значениям функции CF добавляются все градации темноты (свое для каждого цветового диапазона). В каждой полосе, для вновь введенных значений CF строятся отрезки геометризованной гистограммы таким же образом как и для других значений [9, 11]. При этом для этих отрезков мы считаем средние значения и диапазоны $G/(G+B)$, оппонентного цветового отношения ($G/(G+R)$ или $R/(R+B)$), и полутоновой компоненты I. Следовательно для «темных» отрезков мы также можем найти цветовые характеристики H и S. Этой конструкцией мы как бы отцепляем темные места и проводим с ними отдельные рассмотрения. Аналогичным образом дополнительные значения CF вводятся для бесцветных точек, которые нумеруются редуцированным числом значений зависящим от полутоновой компоненты и цветового диапазона. Для этих значений мы также строим системы отрезков и вычисляем средние значения и диапазоны $G/(G+B)$, оппонентного цветового отношения ($G/(G+R)$ или $R/(R+B)$), и I. Кроме того, подобная конструкция проводится также для точек с очень яркими значениями. Для таких точек вводятся дополнительные значения CF, строятся отдельно системы интервалов геометризованной гистограммы, и дополнительно считаются их цветовые характеристики. С помощью данного метода осуществляется отщепление темной, очень яркой и малонасыщенной частей изображения и точки указанных областей разделяются введенными новыми параметрами.

Для вновь введенных окрашенных отрезков геометризованной гистограммы также выполняется кластеризация, и дополнительные цветовые сгустки включаются в структурный граф цветовых сгустков STG(CI) [10, 11]. Напомним, что вершины STG(CI) есть кластеры окрашенных отрезков GH_s для каждой полосы. Ребра графа соединяют кластеры соседних полос с близкими цветовыми характеристиками, которые также близки как

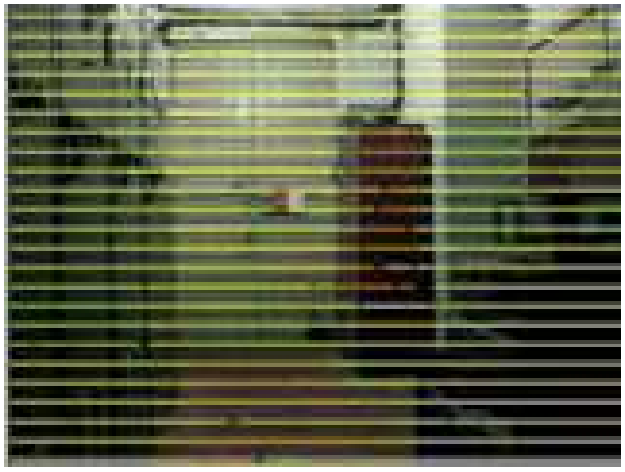


Рис. 1. Цветовые сгустки с выделенным ориентиром.

отрезки Ax. Данные формальные приемы делают попытку учесть в конструкции геометризованной гистограммы интегрирующие способности зрения человека в темных, ярких и малонасыщенных областях. Многочисленные эксперименты показали, что предложенная модификация конструкции геометризованной гистограммы серъезно повышает ее разделяющую способность (свойство разделять с помощью структурного графа цветовых сгустков STG(CI) реальные объекты на изображениях).

Применение для поиска ориентиров

Одной из мотивировок модификации метода геометризованных гистограмм были эксперименты по нахождению и захвату и прослеживанию в серии кадров как естественных ориентиров, так и искусственных, специально нанесенных на поверхность, при движении робота в помещении. При этом не предполагалось никаких ограничений на освещение сцены. Не предполагалось также, что ориентир находится на контрастном фоне. Наоборот рассматривались сцены, в которых ориентир находится среди среды, загроможденной другими предметами, и может находиться на фоне близком по цветовым характеристикам. Это означает, что фактически делалась попытка решения задачи поиска предмета с заданной формой и цветом в реальной среде рабочих помещений.

В качестве искусственного ориентира были выбраны три прямоугольника оранжевого, белого и зеленого цветов, последовательно соединенные между собой в одну фигуру прямоугольной формы. Не делалось предположений, фактически тривиализующих задачу, типа: метка размещается на потолке белого цвета или на стене белого цвета в пустом помещении. Метки развешивались на стенках разного цвета и среди других предметов в загроможденных помещениях. Примеры сцен, результаты обработки в виде структурного графа цветовых сгустков STG(CI) и в виде сгустков, наложенных на средние линии полос изображений, задаваемых полутоновыми компонентами исходных изображений, можно найти в [14]. Так как данные иллюстрации требуют существенного использования цвета для их понимания и есть ограничения по размеру, то в работе помещен только один пример, а вся серия размещена на сайте. Рис. 1 содержит ориентир, выделенный на изображении коридора, снятом при обычном слабом освещении. Цвет двери, на которой повешен ориентир, почти совпадает с цветом одной из частей ориентира. На полутоновой компоненте изображения глазу человека заметна только белая часть ориентира. Структурные связи существенны при поиске этого ориентира.

Применение структурного графа к разработке детектора характерных признаков (salient features)

Полезные промежуточные результаты, которые востребованы в приложениях, получаются используя так называемые детекторы характерных признаков (salient features) [4, 5]. Один из самых известных детекторов предложен в [4]. Его построение основано на изучении локальных гистограмм функций интенсивности, задающих изображение (распределения вероятностей в окрестности точек). Для устранения влияния шума и случайных факторов производится интегрирования по шкалам (глубинам локального рассмотрения). Детектор выявляет достаточно много существенных мест изображения, которые далее анализируются при помощи других методов. Например находится контур границы найденного объекта [5]. Однако из общих соображений ясно и подтверждается примерами, что детектор будет достаточно плохо работать на мелких деталях, анализ которых требует привлечения семантики. Кроме того этот детектор совершенно не отслеживает структурные связи.

Структурный граф цветовых сгустков совместно с геометризованной гистограммой дают более тонкий инструмент для выявления характерных признаков. С помощью пространства отрезков геометризованной гистограммы фиксируются даже небольшие вкрапления в основной фон и его небольшие вариации. Структурный граф цветовых сгустков содержит наиболее заметные и массивные детали. Он описывает фоновые сгустки в каждой полосе, несколько основных сгустков в полосе в случае границ областей и текстур, и массивные вариации на их фоне. На структурном графе вводятся дополнительные отношения, которые позволяют получить с его помощью более точное описание исходного изображения. Более тонкие, но достаточно длинные детали сохранены в геометризованной гистограмме. Для всех вершин структурного графа, принадлежащих одному слою (полосе) и соседним слоям (полосам), определены отноше-

ния соседства в виде списков соседних вершин, т. е. имеем полный список граничащих сгустков. Дополнительно ребрами графа соединены сгустки, близкие по цвету и у которых близки их геометрические описания [9, 11].

Кроме того, цветовым сгусткам в каждой полосе ставятся в соответствие такие качественные характеристики как «чистый сгусток, порождающий полосу», «доминирующий сгусток», «один из основных сгустков», «существенный контрастный сгусток на фоне доминирующего», «заметный сгусток», и так далее. Для выполнения указанной классификации разработана система продукций, которая, на основе численных характеристиках цветовых сгустков и их взаимодействия, делает заключение о том, к какому классу принадлежит рассматриваемый сгусток.

Детектор, разработанный на основе метода геометризованных гистограмм, находит и выделяет изолированные вершины структурного графа как точечные объекты интереса, центры однородных систем вершин связанных ребрами на графе (центры связных компонент), соответствующих доминирующим сгусткам, и центры систем вершин, соответствующих текстурным областям. Кроме того выделяются объекты, соответствующие тем интервалам геометризованной гистограммы, которые заметны в некотором смысле на фоне доминирующих цветовых сгустков структурного графа.

Разработанный детектор характерных признаков был в числе прочих изображений применен к основному изображению [5], называющимся «TreeAndHorse». В [5] анализируются результаты сегментации полученные различными известными методами и показывается, что они не могут обнаружить многие важные детали. Сравнивая наши результаты с результатами [5] необходимо отметить, что были дополнительно к деталям найденным методом [5] обнаружены такие интересные детали, как стадо овец вдали, изгородь на переднем плане, и удаленные отдельные деревья были более точно классифицированы.

Выводы

В работе производится модификация понятия геометризованной гистограммы, которая позволяет применение метода к анализу изображений с значительными малонасыщенными, темными и яркими подобластями. Модифицированный метод геометризованных гистограмм применяется для поиска ориентиров на изображениях с целью обеспечить точную навигацию автономного робота и выполнение им интеллектуальных задач поиска предметов заданной формы и заданных цветовых, текстурных (или их комбинацией) характеристик.

Визуализированные результаты экспериментов приведены в работе и на сайтах [14, 15]. В следующих работах предполагается рассказать о применении развитых методов в системе зрения автономного робота.

Литература

[1] *Xie X., Mirmehdi M.* Colour Image Segmentation Using Texems // Annals of BMVA — 2007. — № 1. — P. 1–10.

[2] *Chang Y. C., Archibald J. K., Wang Y.-G., Lee D. J.* Texture-based Color Image Segmentation Using Local Contrast Information // International Journal of Information Technology and Intelligent Computing. — 2007. — V. 2, № 4. — P. 54–62.

[3] *Deng Y., Manjunath B. C.* Unsupervised Segmentation of Color Texture Regions in Images and Video // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. — 2001. — V. 23, № 8. — P. 800–810.

[4] *Kadir T., Brady M.* Saliency, Scale and Image Description // International Journal of Computer Vision. — 2001. — V. 45, № 2. — P. 83–105.

[5] *Mishra A. K., Aloimonos Y.* Active Segmentation // International Journal of Humanoid Robotics. — 2009. — V. 6, № 3. — P. 361–386.

[6] *Кий К. И.* Новый тополого геометрический метод обработки изображений и его применение к анализу дорожных сцен // Известия Российской Академии Наук, сер. Техническая Кибернетика. — 1992. — V. 31, № 5. — P. 244–248.

[7] *Kiy K. I.* An Unsupervised Color Vision System for Driving Unmanned Vehicles // SPIE AeroSense'98 Symposium, Enhanced and Synthetic Vision 1998, Orlando, USA, 1998. — P. 371–382.

[8] *Kiy K. I., Dickmanns E. D.* A New Method for Description and Generalized Segmentation of Color Images in Real Time // IEEE Intelligent Vehicle'04 Symposium, Parma, Italy, 2004. — P. 54–59.

[9] *Kiy K. I.* A New Method for Description and Generalized Segmentation of Color Images in Real Time // International Conference on Pattern Recognition and Image Analysis: New Information Technologies, Nizhni Novgorod, 2008. — P. 297–300.

[10] *Кий К. И.* Геометризованные гистограммы и понимание изображений // XIV всеросс. конф. Математические методы распознавания образов, ММРО-14, Суздаль, 2009. — С. 362–365.

[11] *Kiy K. I.* A New Real-Time Method for Description and Generalized Segmentation of Color Images // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2010. — V. 6, № 2. — P. 169–178.

[12] *Hubel D. H.* Eye, Brain, and Vision. — New York: Scientific American Library, 1988. — 514 с.

[13] *Finlayson G. D., Hordley S. D., Drew M. S., Lu C.* On the Removal of Shadows from Images // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. — 2006. — V. 28, № 1. — P. 59–68.

[14] `www.sites.google.com/site/colorvisionkikiy/` — Color vision — 2010.

[15] `www.tz2010.cosmos.ru/` — Cosmos.ru — 2010.

Скелетизация полутоновых изображений отпечатков пальцев для задачи идентификации личности*

Котик С. В.
kot_serg@inbox.ru
Москва, ВЦ РАН

В статье рассматривается обработка изображений отпечатков пальцев для последующего распознавания по особым точкам папиллярного узора. Для этой цели строится скелет полутонового изображения. Основной принцип - построение скелета полутонового изображения из частей скелетов бинарных изображений, полученных в результате бинаризации исходной картинки с различными порогами. Такая совокупность фрагментов скелета позволяет получить достаточно четкое бинарное изображение отпечатка пальца. По нему в свою очередь строится окончательный скелет, позволяющий проводить сравнение по особым точкам, который и рассматривается как скелет серого изображения.

Grayscale images of fingertips prints skeletonization concerning the problem of personal identification*

Kotik S.
CCAS, Moscow, Russia

In this article fingertips prints images processing is considered for the purpose of further recognition by particular points of a finger papillary pattern. Grayscale image skeleton is constructed. The main idea is construction of the grayscale image skeleton using some parts of binary images skeletons. These binary images one can obtain after binarization of initial image with various brightness levels. Such skeleton fragments collection makes rather accurate fingertip binary image. The next step is constructing of the final skeleton of this binary image, which one can call the grayscale image skeleton. By means of this final skeleton one can make recognition by particular points of a finger papillary pattern.

Задача распознавания личности по биометрической информации становится все более актуальной в наше время. И не только в криминалистике — в повседневной жизни на режимных объектах или в крупных корпорациях со строгой политикой безопасности зачастую требуется ограничить доступ «только для своих» в какие-то помещения, либо к важной информации. По радужной оболочке глаза, по голосу, по двумерному и по объемному изображению можно идентифицировать человека. Но одним из наиболее распространенных и надежных способов было и остается распознавание по отпечатку пальца.

Проблемы здесь, как и в распознавании по другим биометрическим признакам кроются в «некачественных» признаках — смазанных или нечетких отпечатках. Самый распространенный метод сравнения отпечатков — по особым точкам папиллярного узора — очень требователен к качеству полученного изображения. Обработка полутонового изображения и построение скелета папиллярного узора позволяет получить достаточно четкое бинарное изображение на основе исходной «некачественной» картинки.

Скелетизация серых (полутоновых) изображений — очень интересная проблема; не существует четкого определения данного понятия и детально проработанной теоретической базы. Однако на данный момент в мире разработано несколько подходов, которые можно условно разделить на две группы. В первой группе изображение рассматривается как трехмерная поверхность, где два измерения — координаты пикселя, а третье — его яркость. Во второй группе алгоритмов производится итерационное удаление точек изображения, пока не останутся срединные оси толщиной в один пиксель (они и будут являться скелетом).

В предлагаемом в данной статье методе скелет полутонового изображения будет рассматриваться как составной из частей скелетов бинарных изображений, и, если рассматривать изображение как тремерную поверхность, линия скелета будет являться «гребнем хребта».

Рассматривается алгоритм построения скелета серого изображения на основе бинаризации с различными порогами исходного изображения для получения четкой бинарной картинки, позволяющей проводить распознавание отпечатков пальцев по особым точкам.

Некоторые сведения о скелетизации бинарного растрового изображения

Скелетом плоской области называется множество ее внутренних точек, имеющих не менее двух ближайших граничных точек.

Другое название скелета — серединные оси или симметрические оси области. С каждой точкой ске-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 08-07-00338.

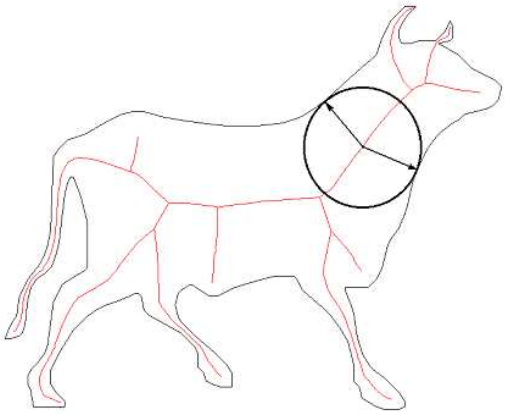


Рис. 1. Скелет изображения и максимальный пустой круг.

лета связана радиальная функция или ширина, которая задает для этой точки ее расстояние от границы области. На основании скелета и ширины можно однозначно реконструировать саму замкнутую область как объединение всех кругов с центрами в точках скелета и радиусами, задаваемыми радиальной функцией. Поэтому скелет вместе с радиальной функцией является, фактически, одним из способов представления замкнутой области.

Скелетом бинарного изображения будем называть объединение всех скелетов компонент изображения. Та часть скелета изображения, которая относится к черным компонентам, составляющим фигуру, называется внутренним скелетом, а часть, относящаяся к белым фоновым компонентам — внешним скелетом бинарного изображения.

Пустым кругом будем называть круг, не имеющий внутренних точек, которые являются граничными для непрерывной фигуры. Максимальным пустым кругом называется пустой круг, не содержащийся целиком ни в каком другом пустом круге, рис. 1. Каждый круг с центром в точке скелета и радиусом, равным радиальной функции в этой точке, является пустым. Такой круг имеет по крайней мере две граничные точки, общие с границей фигуры, поэтому он является максимальным.

Это свойство является характеристическим для точек, составляющих скелет изображения: скелет является геометрическим местом точек — центров максимальных пустых кругов.

В качестве наиболее простого случая рассмотрим пример фигуры, границей которой является простой многоугольник, рис. 2. Максимальные пустые круги касаются границы по крайней мере в двух точках. Точка касания может быть вершиной многоугольника, либо быть внутренней точкой какого-либо отрезка прямой, являющегося стороной многоугольника. От типа точек касания (вершины или нет) зависит форма серединных осей, составляющих скелет.

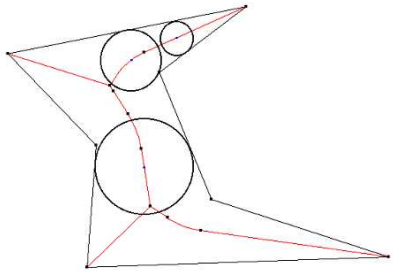


Рис. 2. Скелет простого многоугольника

Представим многоугольную границу как объединение непересекающихся множеств точек — так называемых сайтов. Сайтами будем считать вершины многоугольников и связные множества остальных точек, т. е. стороны многоугольников без вершин (открытые сегменты). Таким образом, имеет сайты-точки и сайты-сегменты.

Пусть максимальный пустой круг касается границы ровно в двух точках. Эти точки принадлежат соответствующим сайтам. Возможны три комбинации типов сайтов: два сайта-сегмента, два сайта-точки, сайт-точка и сайт-сегмент.

В окрестности точки — центра пустого круга найдутся другие точки, которые также равноудалены от пары этих же сайтов. Следовательно, в окрестности рассматриваемой точки — центра пустого круга — серединная ось представляет собой линию, равноудаленную от пары сайтов. В зависимости от типажа этих сайтов форма линии будет либо прямая, либо парабола.

В скелете также выделяются точки соединения трех или большего числа серединных осей. Каждая такая точка является центром пустого круга, касающегося границы в трех или более точках. Кроме того, существуют еще такие точки скелета, в которых соединяются всего две оси, одна из которых является параболой, а другая — либо прямая, либо тоже парабола. У кругов с центрами на таких линиях есть общий сайт-точка. Вершинами степени 1 являются концевые точки скелета, из которых выходит только одно ребро, вершинами степени 2 — такие, из которых выходят два ребра и вершинами степени 3 — такие, из которых выходят три ребра.

Из всего вышесказанного следует, что скелет многоугольника представляет собой плоский граф [1, 2].

Общий подход

На вход алгоритму подаётся полутоновое изображение отпечатка пальца, на выходе получаем бинарное изображение скелета, по сути бинаризованную и «почищенную» исходную картинку. Алгоритм относится к первому классу из упомяну-

Рис. 3. Исходное полутоновое изображение → бинарные «срезы» → фрагменты бинарных изображений, восстановленные на основе «почищенных» скелетов → бинарное изображение, построенное на основе полученного скелета серого изображения.

Рис. 4. Бинарный «срез» → то же изображение после первого этапа → то же изображение после второго этапа.

тых во вступлении — изображение рассматривается как трехмерная поверхность. Основная идея состоит в том, что скелет серого изображения собирается на основе частей скелетов бинарных растровых «срезов», полученных при простой бинаризации исходного изображения по нескольким уровням яркости. Идея обработки полутонового изображения на основе полученных бинарных «срезов» уже предлагалась ранее в работе [3].

Количество «слоев» и пороговые значения для бинаризации позволяют добиваться нужного соотношения качество-скорость. По алгоритму, описанному ниже для каждого скелета бинарного растрового среза производится отбор ветвей и вершин, так называемая «чистка», после чего по отобранным ветвям и вершинам производится восстановление фрагмента бинарного изображения. Следующим шагом такие фрагменты накладываются друг на друга, и получается конечное четкое бинарное изображение отпечатка пальца, по которому уже и строится скелет, позволяющий проводить сравнение особых точек папиллярного узора. На рис. 3 показаны основные шаги алгоритма. Исходное серое изображение отпечатка пальца берется инвертированным для удобства обработки. В общих чертах предложенный подход рассматривался в работе [5].

Алгоритм «чистки» скелетов бинарных изображений

Алгоритм состоит из двух этапов, рис. 4. После первого этапа остаются только те ветви скелета, обе вершины которых удовлетворяют пороговым условиям для радиуса максимального пустого круга. Представление о подмножестве исследуемых изображений (отпечатки пальцев) позволяет нам ввести такой фильтр, и, таким образом, мы избавляемся от слишком толстых и слишком тонких линий, которые заведомо не являются участками папиллярного узора.

Рис. 5. Исходные серые изображения и получившиеся итоговые бинарные изображения, по которым строится скелет.

Далее мы избавляемся от шумов, появившихся при бинаризации, вводя порог для длины цепи вершин и ветвей скелета. Цепь — все последовательные ветви и вершины скелета, конечной вершиной цепи может служить вершина скелета степени 1, либо степени 3. На данном этапе мы избавляемся от многочисленных «перемычек» между папиллярами, сильно зашумляющих изображение.

На обоих этапах «чистки» принимаются во внимание особенности изображений отпечатков пальцев, что позволяет оставлять только те фрагменты скелета, которые имеют отношение к значимой части изображения. В дальнейшем планируется раз-

работать адаптивную «чистку» шумов для более аккуратной обработки особых точек папиллярного узора.

Исходные и обработанные изображения

На рис. 5 показаны исходные серые изображения и соответствующие им конечные бинарные изображения, по которым строятся итоговые серые скелеты.

Как видно, по некачественному изображению не удалось восстановить полностью четкую бинарную картинку, однако достаточно много особых точек на картинке присутствуют. На более четких исходных изображениях строится почти идеальная картинка.

Выводы

Предлагаемый метод скелетизации полутонового изображения разработан для определенного подмножества изображений — отсканированных отпечатков пальцев. Он позволяет на основе исходной, зачастую, «некачественной» картинки получить пригодное для дальнейшего распознавания бинарное изображение папиллярного узора. По сути, это некий метод интеллектуальной бинаризации серого изображения на основе скелетизации. В ходе дальнейших исследований планируется разработка новых фильтров на этапе «чистки» скелета бинарного изображения, адаптивная обработка особых точек папиллярного узора и улучшение характеристик работы при выделении цепей. Время работы алгоритма также планируется сократить. Возможно рассмотрение приложений построения скелета серого изображения относительно других прикладных задач, например, в картографии.

Литература

[1] *Местецкий Л. М.* Векторизация бинарных растровых изображений на основе аппроксимации // Доклады X Всероссийской конференции «Математические методы распознавания» (ММРО-10). Москва, 2001.

[2] *Местецкий Л. М.* Непрерывный скелет бинарного растрового изображения // Труды международной конференции «Графикон-98». Москва, 1998.

[3] *Котик С. В., Местецкий Л. М.* Сжатие полутоновых изображений рукописных документов на основе кодирования по изолиниям яркости // Доклады XII Всероссийской конференции «Математические методы распознавания» (ММРО-12). Москва, 2005

[4] *Mersal S. S., Darwish A. M.* A New Parallel Thinning Algorithm For Gray Scale Images // Works of IEEE-EURASIP Workshop on Nonlinear Signal and Image Processing — NSIP'99. Antalya, 1999.

[5] *Котик С. В.* Скелетизация полутонового изображения на примере обработки изображений отпечатков пальцев // Таврический вестник информатики и математики. Симферополь, 2008.

Обнаружение локальных искусственных изменений на крупноразмерных изображениях*

Кузнецов А. В., Глумов Н. И.
kuznetsoff.andrey@gmail.com, nglu@smr.ru
Самара, Учреждение Российской академии наук Институт систем обработки изображений (ИСОИ) РАН

В статье решается задача обнаружения локальных искусственных изменений (фальсификаций) изображений. Рассмотрены основные свойства изображений (наличие дубликатов, ресэмплирование, применение JPEG-сжатия), на основе анализа которых можно выделить произведенные изменения на изображении. Известные методы обнаружения перечисленных свойств пока не удовлетворяют в полной мере требованиям по оценке достоверности фотографий ни по надежности, ни по вычислительной сложности. В данной работе решалась задача развития этих методов, улучшения их характеристик с целью возможного применения для обнаружения локальных искусственных изменений на крупноразмерных изображениях. Применение рекурсивных методов обработки в скользящем окне позволило значительно ускорить обработку изображений, а применение новых признаков при анализе повысить надежность выделения изменений, а также устойчивость алгоритмов к искажениям изображений.

The detection of local artificial changes on large-scale images*

Kuznetsov A. V., Glumov N. I.
Image Processing Systems Institute (IPSI) RAS, Samara, Russia

Algorithms for detection images local artificial changes (forensics) are proposed in this paper. There are various basic properties of images (the presence of duplicates, resampling, JPEG-compression application) analyzing which it is possible to allocate the changes in the image. For the time being the common detection methods of the listed properties do not meet full demands of photos validity neither on reliability, nor on computing complexity. In the current work we solved the task of development and characteristics improvements of these methods with the view of their possible use in detection of local artificial changes on large-sized images. Application of recursive processing methods in the running window allowed to accelerate the images processing considerably, and using the new features in the analysis made it possible to raise reliability of changes allocation, and also to improve stability of algorithms to distortions of images.

Искусственное изменение локальных областей на изображении фактически является его фальсификацией, производимой в политических, рекламных, зачастую попросту корыстных целях. Она неразрывно связана с появлением фотографирования и с самого начала широко использовалась техника ретуширования фотографий. Хорошо известно, что многие сохранившиеся до настоящего времени исторические фотографии являются фальсифицированными. На рис. 1 приведен пример такой фотографии – исходной, на которой изображены известные политические деятели СССР, и измененной, где убрана одна из фигур по политическим соображениям.

С появлением цифровых технологий обработки изображений возможности фальсификации изображений значительно расширились. Не представляет трудности изменить часть изображения с помощью современных редакторов цифровых изображений (например, Adobe Photoshop). Применение таких алгоритмов обработки как сглаживание границ, размытие области, увеличение и уменьше-

Рис. 1. Пример фальсификации исторической фотографии.

ние контраста приводит к тому, что даже опытный взгляд не распознает подделку. Распространение таких фальсифицированных изображений может нанести значительный ущерб политическим, экономическим, научным интересам общества. В связи с этим является актуальной задача разработки методов и алгоритмов выявления искусственных локальных изменений на изображениях. Именно цифровые алгоритмы анализа позволяют определить наличие изменений на изображении, локализовать их, определить (при необходимости) параметры примененных при фальсификации алгоритмов. При фальсификации изображения ключевым моментом является замена части (фрагмента произвольной формы) исходного изображения, т. е. локальное встраивание нового фрагмента. В качестве нового фрагмента могут использоваться как

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № № 09-01-00511, 07-01-96612), ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (контракт № 02.740.11.0001).

участки исходного изображения (например, фона или некоторой текстуры), так и фрагмент совершенно другого изображения. В соответствии с этими способами встраивания разрабатываются алгоритмы выявления изменений. В первом случае алгоритмы направлены на выявление дублирующихся областей (дубликатов) на изображении (возможно с небольшими изменениями яркости, геометрии), а во втором алгоритмы направлены на выявление отличающихся свойств исходного изображения и встроенного фрагмента. К таким свойствам относятся характеристики примененных для изображений алгоритмов преобразований — ресэмплинга, JPEG-сжатия, цветового преобразования. Существующие методы выявления изменений [1], как правило, предназначены для анализа изображений небольшого размера, т. к. при обработке необходимо использование всего изображения. Такой подход не годится при анализе крупноразмерных изображений, размер которых многократно превышает размер измененной локальной области. В данной работе разработаны и исследованы алгоритмы выявления локальных изменений, реализуемые в режиме скользящего окна, что позволяет применить алгоритмы для анализа на крупноразмерных изображениях.

Обнаружение дубликатов на изображении

Одной из задач фальсификации изображений является устранение на изображении некоторого объекта (например, человека). Такая операция обычно производится путем замены соответствующей области изображения на участки фона, окружающего устраняемый объект. Это легко сделать в современных системах обработки изображений — например, с помощью инструмента Cloning в Adobe Photoshop несложно убрать человека с фотографии, закрыв его текстурой (морской пеной) (см. рис. 2). Следует отметить, что при замене одних фрагментов изображения на другие могут осуществляться различные преобразования (яркостные, геометрические) дублируемых фрагментов.

Для анализа подделок такого класса изображение делится на блоки с перекрытиями, и для каждого такого блока вычисляется вектор-признак (очевидно, что чем меньше сдвиг одного блока, тем выше точность обнаружения дубликата, и тем дольше времени требуется для анализа). В известных работах по данной тематике [2,3,4] не уделяется достаточного внимания проблемам выбора размеров блоков, значения сдвига блока, признаков блока — они либо недостаточно описаны, либо выбраны конкретные решения без надлежащего обоснования и не всегда удовлетворяющие всем требованиям к алгоритму по надежности и вычислительной сложности. Предлагаемый подход включает решение всех поставленных вопросов. Он основан на следующих принципах, обеспечивающих оптимизацию задачи в координатах «надежность решения — вычислительная сложность»:

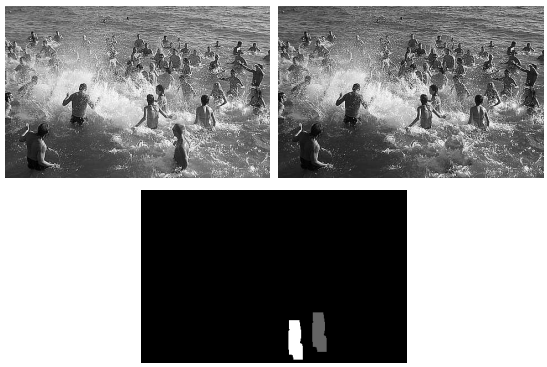


Рис. 2. Исходное изображение, измененное путем дупликации текстуры и результат обнаружения дубликатов.

1. Применение преобразования Фурье-Меллина [5,6] для вычисления признаков, используемых при сравнении блоков. Эти признаки инвариантны к повороту и масштабированию фрагмента изображения. Инвариантность к линейным преобразованиям яркости легко обеспечивается предварительной обработкой блока изображения.
2. Использование схемы с перекрытиями блоков (повышает надежность алгоритма) и режима скользящего окна для рекурсивного вычисления спектра Фурье (снижает вычислительную сложность). Путем попарного сравнения всех признаков блоков по критерию евклидова расстояния между их векторами признаков формируется набор наиболее близких друг к другу.

Предполагая, что размеры встроенной области превышают размеры блока, далее производится окончательный отбор похожих блоков с учетом их расположения на изображении, а именно по критерию их группировки по смещению друг относительно друга (см. рис. 2). Проведенные исследования алгоритма позволили определить допустимые значения для угла поворота $0\,^\circ$-$10\,^\circ$ и параметра масштабирования дубликата 0%-10%.

Выделение ресэмплированных областей

При встраивании в изображение фрагмента другого изображения обычно необходимо изменение размера фрагмента, его поворот или более сложное преобразование (например, аффинное). На рис. 3 приведен пример такого встраивания с изменением размера цифры «1». Любое геометрическое преобразование реализуется с помощью алгоритма интерполяции (например, бикубической). В этом случае значительно возрастает корреля-

ция между соседними пикселями ресэмплированного фрагмента, т. е. значение каждого пикселя зависит от его окружения:

$$X(m,n) = \sum_{(k,l)\neq(0,0)} X(m-k, n-l)\,\alpha(k,l) \qquad (1)$$

Причем внутри ресэмплированной области коэффициенты зависимости (1) сохраняются для различных пикселей.

Рис. 3. Фото автомобильного номера (до и после изменения).

В известном алгоритме [1,7] выделения ресэмплированных областей анализируемое изображение делится на блоки, для каждого из которых производится оценка корреляционной зависимости между пикселями с помощью EM-алгоритма (Expectation-Maximization). Вводятся две гипотезы принадлежности пикселя в блоке к классам M_1 и M_2. К первому относятся пиксели, коррелирующие с соседними, ко второму — остальные пиксели. По правилу Байеса вычисляются вероятности попадания того или иного блока к одному из классов M_1 и M_2. Данный алгоритм итерационный, с каждой итерацией коэффициенты зависимости (1) уточняются до тех пор пока погрешность зависимости (1) не станет ниже допустимой (с учетом разделения пикселей на классы M_1 и M_2). Полученные данные образуют матрицу, называемую матрицей вероятностей (см. рис. 4). На этой матрице в ресэмплированных областях наблюдается периодическая структура, которую легко обнаружить с помощью преобразования Фурье.

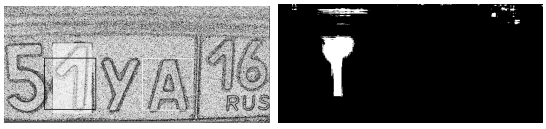


Рис. 4. Матрица вероятностей принадлежности пикселей классу M_1 и результат выделения ресэмплированной области.

На рис. 4 выделены фрагменты, соответствующие встроенному с ресэмплированием и исходному изображениям. Для этих фрагментов на рис. 5 показаны спектры Фурье, на спектре от матрицы вероятностей для встроенного блока хорошо выделяются яркие пики, по которым в общем случае можно определить параметры примененного геометрического преобразования (коэффициента масштабирования и поворота).

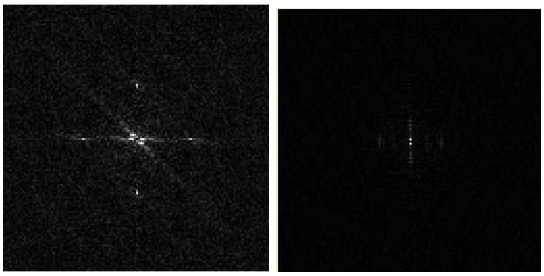


Рис. 5. Спектр Фурье (слева — для части встроенного блока, справа — для части исходного блока изображения).

При практическом применении алгоритма выделения ресэмплированных областей на изображении их расположение неизвестно, такие области могут и отсутствовать. В локальном спектре (рекурсивное вычисление) с помощью пикового фильтра [8] выделяются выбросы и принимается решение о наличии ресэмплированной области (см. рис. 4).

Выявление JPEG сжатия

При встраивании одного фрагмента изображения в другое изображение существует большая вероятность, что для них ранее производилась различная обработка, в частности, сжатие изображения с помощью алгоритма JPEG на основе дискретного косинусного преобразования (ДКП). Применение JPEG-сжатие вносит в изображение весьма существенные искажения, зависящие от параметра — коэффициента качества Q ($0 < Q \leqslant 100$). Этот параметр качества управляет квантованием коэффициентов ДКП. Поэтому результат применения JPEG-сжатия хорошо виден на гистограммах коэффициентов ДКП, вычисленных для фиксированных компонент спектра по блокам изображения.

Анализируя гистограммы коэффициентов ДКП, можно определить факт применения JPEG-сжатия для целого изображения. При этом возможны ситуации — JPEG-сжатие не производилось, производилось однократно, производилось неоднократно с различными параметрами качества [1,9].

Предлагаемый алгоритм выявления JPEG-сжатия (в отличие от известных) направлен на решение более сложной задачи выявления локальных областей на изображении, отличающихся JPEG-свойствами, т. е. параметрами примененного JPEG-сжатия или их отсутствием. На первом этапе производится глобальная оценка изображения. При этом используется гипотеза, что большая часть изображения имеет одинаковые JPEG-свойства. Сначала определяется смещение $(\Delta x, \Delta y)$ разбиения изображения на блоки (исходное изображение после JPEG-сжатия могло быть кадрировано). Для каждого возможного смеще-

ния $0 \leqslant \Delta x,\ \Delta y < 8$ определяется правдоподобность применения JPEG-сжатия для большей части изображения и выбирается наибольшая. Ключевым звеном алгоритма является использование признака периодичности гистограмм коэффициентов ДКП, который вычисляется как дисперсия разности координат, выделенных на гистограмме соседних пиков $PeakH$:

$$D = D\left\{(arg(PeakH_i) - arg(PeakH_{i-1}))\right\}$$

На втором этапе используется итерационный алгоритм кластеризации блоков изображения (с учетом найденного смещения) на различные классы, отличающиеся JPEG–свойствами. Сначала производится предварительное разделение блоков изображения на два класса — «фон» (блоки преобладающей части изображения) и «не фон» (остальные блоки, в том числе блоки, для которых нет уверенности). Для этого изображение делится на макроблоки (не менее 64×64 пикселей), для которых по гистограммам коэффициентов ДКП вычисляются вышеприведенный признак периодичности и признак монотонности:

$$M = \sqrt{\sum_i \left(\frac{PeakH_i}{PeakH_{i-1}}\right)^2}$$

По этим признакам выделяются похожие макроблоки, которые и составляют первый класс. Далее для каждого класса формируются гистограммы коэффициентов ДКП и оцениваются вероятности соответствия каждого блока изображения одному из классов. Итерации прекращаются, когда стабилизируется процесс перетекания блоков из класса в класс. Окончательно для найденных классов по их гистограммам и вычисленным признакам делается вывод о произведенном ранее сжатии. Проведенные исследования показали надежное выделение областей с JPEG-сжатием на несжатом фоне, выделение областей с различными качествами при $|Q_1 - Q_2| > 30$, а также выделение областей с двукратным сжатием на однократно сжатом фоне. Результаты исследования качества обнаружения двойного JPEG-сжатия представлены в таблице 1. Измерения представляют собой средние значения качества по 15 изображениям.

Следует также отметить, что значение ошибки обнаружения (ошибка второго рода) при проведении экспериментов достигало значений от 5% до 15%, что можно считать приемлемым результатом при условии высокой достоверности обнаружения встраиваний.

Заключение

В настоящее время в связи с общественной и научной значимостью задачи оценки достоверности фотографий разработка методов выявления искусственных изменений изображений (фальсификаций) стала активно развивающимся направлением в области цифровой обработки изображений. В последние годы появился ряд работ по этой тематике, в которых определены основные свойства изображений, на основе анализа которых можно выделить произведенные изменения на изображении. Следует отметить, что применение рекурсивных методов обработки в скользящем окне позволило значительно ускорить обработку изображений, а применение новых признаков при анализе повысить надежность выделения изменений, а также устойчивость алгоритмов к искажениям изображений.

Таблица 1. Зависимость точности обнаружения двойного сжатия JPEG от различных комбинаций параметров качества Q1 и Q2.

		Q2				
		50%	***60%***	***70%***	***80%***	***90%***
Q1	***50%***		80%	90%	100%	95%
	60%	80%		90%	100%	95%
	70%	85%	95%		95%	90%
	80%	100%	100%	95%		80%
	90%	95%	95%	95%	75%	

Литература

[1] *Popescu A. C.* Statistical Tools for Digital Image Forensics // PhD thesis, Dartmouth College, Dep. of Computer Science, USA , 2005 — P. 11–102.

[2] *Bayram S., Sencar H. T., Memon N.* A Survey of Copy-Move Forgery Detection Techniques // IEEE Western New York Image Processing Workshop, NY, September, 2008 — P. 1–2.

[3] *Popescu A. C., Farid H.* Exposing digital forgeries by detecting duplicated image regions // Technical Report, TR2004-515, Dartmouth College, Dep. of Computer Science, USA, 2004 — P. 1–2.

[4] *Bayram S., Sencar H. T., Memon N.* An efficient and robust method for detecting copy-move forgery // submitted to ICASSP 2009 — P. 2–3.

[5] *Sheng Y, Arsenault H. H.* Experiments on pattern recognition using invariant Fourier-Mellin descriptors // J. Opt. Soc. Am. A., 3(6), 1986 — P. 771.

[6] *Lin C. Y., Wu M., Bloom J. A., Cox I. J., Miller M. L., Lui Y. M.* Rotation, scale, and translation resilient watermarking for images // IEEE Trans Image Process, 10(5), 2001 — P. 767–782.

[7] *Popescu A. C., Farid H.* Exposing digital forgeries by detecting traces of re-sampling // IEEE Trans. on Signal Processing, 53(2), 2005 — P. 758–767.

[8] *Chernov A. V., Chernov V. V., Chicheva M. A. and others* Methods of Computer Image Processing, Ed. Soifer V. A. — Mosow: Fizmatlit, 2001.

[9] *Fridrich J., Lukas J.* Estimation of primary quantization matrix in double compressed JPEG images // Digital Forensic Research Workshop, 2003 — P. 1–2.

Оптимальный выбор параметров в упрощенной схеме детектора Харриса*

Лепский А. Е.
alex.lepskiy@gmail.com
Москва, Государственный университет — Высшая школа экономики

В докладе рассматривается бинарный аналог детектора Харриса вычисления оценок кривизны оцифрованной кривой. Исследуются систематическая ошибка, смещение и случайная ошибки оценивания в случае вероятностного зашумления кривой. Определяются оптимальные параметры метода. Сравниваются качественные характеристики этого метода с другими известными схемами.

The optimal choice of parameters in a simplified scheme of Harris detector*

Lepskiy A. E.
State University — Higher School of Economics, Moscow, Russia

This report is devoted to one implicit locally approximate method of estimating the curvature of digitized noisy curve. This method is a binary analog of a well-known Harris detector. We are researched the systematic error, random error and bias estimates in the case of probabilistic noisy of curve. Optimum parameters of the method are defined. We are compared quality characteristics of this method with other well-known approaches.

Введение

Кривизна, наряду с краем, является одной из важнейших низкоуровневых особенностей изображения. Оценки кривизны применяются для получения аналитических характеристик формы объекта, для детекции информативных признаков изображений с целью дальнейшего решения задач классификации, компактного хранения и быстрой обработки. Кроме того, оценки кривизны непосредственно используются в алгоритмах оптимальной интерполяции и в конечно-элементом анализе.

Если Γ — гладкая кривая на плоскости $\mathbb{R}^2$, то кривизну можно рассматривать как результат действия на Γ оператора Cur_R: $k(\mathbf{g}) = \mathrm{Cur}_R[\Gamma](\mathbf{g})$ для всех $\mathbf{g} \in \Gamma$, определенного на множестве $C^1(\mathbb{R}^2)$ всех гладких кривых плоскости $\mathbb{R}^2$. Переход с плоскости $\mathbb{R}^2$ на сетку $\mathbb{Z}^2$ осуществляется с помощью некоторого оператора дискретизации D: $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{Z}^2$, который ставит в соответствие гладкой кривой $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ оцифрованную кривую $\tilde{\Gamma}=D(\Gamma) \subset \mathbb{Z}^2$. Пусть $C_D(\mathbb{Z}^2) = \{\tilde{\Gamma} = D(\Gamma)\colon \Gamma \in C^1(\mathbb{R}^2)\}$. Возникает вопрос, как определить «кривизну» оцифрованной кривой $\tilde{\Gamma}$? В общем случае под оценкой кривизны дискретной (оцифрованной) кривой $\tilde{\Gamma}$ в точке $\mathbf{g} \in \tilde{\Gamma}$ будем понимать такую скалярную функцию $k_\varepsilon(\mathbf{g})$, зависящую от векторного параметра ε, что для гладкой кривой $\Gamma \in C^1(\mathbb{R}^2)$ выполняется равенство $\lim\limits_{\varepsilon \to \varepsilon_0} k_\varepsilon(\mathbf{g}) = k(\mathbf{g})$ для всех $\mathbf{g} \in \Gamma$, где ε_0 — некоторое значение вектора параметров. Чаще всего параметр ε характеризует размер окрестности, в пределах которой вычисляется оценка. Пусть $k_\varepsilon(\mathbf{g}) = \mathrm{Cur}_{Z,\varepsilon}[\tilde{\Gamma}](\mathbf{g})$. Как правило, оператор кривизны $\mathrm{Cur}_{Z,\varepsilon}$ на $C_D(\mathbb{Z}^2)$ определяется как суперпозиция $\mathrm{Cur}_{Z,\varepsilon} = \mathrm{Cur}_R \circ A_\varepsilon$, где $A_\varepsilon\colon C_D(\mathbb{Z}^2) \to C^1(\mathbb{R}^2)$ — некоторый оператор гладкой аппроксимации цифровой кривой. Если A_ε — оператор (локальной) интерполяции, то такой метод оценивания кривизны будем называть локально-интерполяционным [2]. Локально-интерполяционные методы реализованы, например, в алгоритмах Bennet и MacDonald, Freeman и Davis и др. Как правило, локально-интерполяционные алгоритмы дополняются процедурами усреднения или сглаживания первичных оценок кривизны (например, в методе Canny), что повышает их устойчивость к зашумлению [2, 3].

Если A_ε — оператор (локальной) аппроксимации, то такой метод оценивания кривизны будем называть локально-аппроксимативным. Аппроксимация может быть как явной (например, аппроксимация дискретной кривой окружностью), так и неявной. В докладе рассматривается неявная схема аппроксимации. Оператор аппроксимации ищется в виде $A = L_R^{-1} \circ L_Z$, где L_R и L_Z — операторы, определенные на множестве всех гладких кривых $C^1(\mathbb{R}^2)$ и всех оцифрованных кривых $C_d(\mathbb{Z}^2)$ соответственно, ставящие в соответствие кривой Γ некоторую, вообще говоря, векторную характеристику $\mathbf{q}(\Gamma)$. Наиболее популярным алгоритмом этого класса является детектор Харриса (Harris) [1], в котором в качестве характеристики $\mathbf{q}(\Gamma)$ рассматривается вектор изменения интенсивностей в разных направлениях полутонового изображения, содержащего кривую.

В докладе рассматривается бинарный аналог детектора Харриса — метод геометрического сглаживания (МГС). Этот метод, по-видимому, впер-

Работа выполнена при финансовой поддержки РФФИ, проекты №08-07-00129-а, №10-07-00135-а, №10-07-00478-а.

вые исследованный в [4], основан на следующем простом наблюдении. Если в точке $\mathbf{g}$ кривая Γ имеет большую кривизну k, то некоторую малую окрестность $U_\varepsilon(\mathbf{g})$ этой точки кривая разделит на две части, площади которых $\mu_\varepsilon(\mathbf{g})$ и $\bar{\mu}_\varepsilon(\mathbf{g})$ будут сильно отличаться друг от друга. И наоборот, если кривизна в точке близка к нулю, то соответствующие площади будут мало отличаться друг от друга. Таким образом, оценка кривизны в МГС равна некоторой функции φ от нормированной разности площадей $|\mu_\varepsilon - \bar{\mu}_\varepsilon|/S_\varepsilon$ (S_ε — площадь окрестности U_ε), расположенных по разные стороны от Γ в пределах окрестности U_ε.

В докладе исследуется задача оптимального выбора параметров МГС в случае вероятностного зашумления кривой. В этой задаче можно выделить две основные подзадачи:

1) найти функцию φ, минимизирующую функционал дисперсии случайной кривизны;

2) определить размер окрестности ε, минимизирующий среднеквадратичную ошибку вычисления оценки кривизны в случае вероятностного зашумления кривой. Решению этих двух задач и посвящена настоящая статья.

Метод геометрического сглаживания

Кривизна и вес. При вычислении кривизны удобно рассматривать ее нормированную оценку — вес, который задается в следующем определении [5]. Пусть $k^\Gamma = k^\Gamma(\mathbf{g})$ — кривизна гладкой кривой Γ в точке $\mathbf{g}$.

Определение 1. *Функцию $v_\varepsilon(\mathbf{g}) = v_\varepsilon^\Gamma(\mathbf{g})$ будем называть ε-весом кривой Γ в точке $\mathbf{g}$, если она удовлетворяет условиям:*

1) $0 \leqslant v_\varepsilon \leqslant 1$ для любого $\varepsilon > 0$;

2) $\lim\limits_{\varepsilon\to+0} v_\varepsilon^\Gamma(\mathbf{g})/\varepsilon = C\,|k^\Gamma(\mathbf{g})|$ для гладкой кривой Γ, где $C > 0$ — некоторая константа, не зависящая от точки $\mathbf{g}$.

Тогда ε-оценкой кривизны кривой в точке $\mathbf{g}$ будет функция $k_\varepsilon(\mathbf{g}) = Cv_\varepsilon(\mathbf{g})/\varepsilon$.

Пусть ρ — метрика в $\mathbb{R}^2$. Зафиксируем точку $\mathbf{g} \in \Gamma$ и рассмотрим ε-окрестность $U_\varepsilon(\mathbf{g}) = \{(\mathbf{x}, \mathbf{g}) : \rho(\mathbf{x}, \mathbf{g}) \leqslant \varepsilon\}$, причем $\varepsilon>0$ такое, что кривая Γ пересекает окружность $\partial U_\varepsilon(\mathbf{g})$ ровно в двух точках. Через $\mu_\varepsilon(\mathbf{g})$ и $\bar{\mu}_\varepsilon(\mathbf{g})$ обозначим площади областей, расположенных по разные стороны от кривой Γ в пределах $U_\varepsilon(\mathbf{g})$, а через $S_\varepsilon(\mathbf{g})$ площадь окрестности $U_\varepsilon(\mathbf{g})$.

Рассмотрим две нормированные разности площадей $\mu_\varepsilon(\mathbf{g})$ и $\bar{\mu}_\varepsilon(\mathbf{g})$:

а) $v_\varepsilon^{(1)}(\mathbf{g}) = |\mu_\varepsilon(\mathbf{g}) - \bar{\mu}_\varepsilon(\mathbf{g})|/\max\{\mu_\varepsilon(\mathbf{g}), \bar{\mu}_\varepsilon(\mathbf{g})\}$;

б) $v_\varepsilon^{(2)}(\mathbf{g}) = |1 - 2\mu_\varepsilon(\mathbf{g})/S_\varepsilon(\mathbf{g})|$.

В некоторых случаях вес $v_\varepsilon^{(2)}$ будем вычислять по формуле $v_\varepsilon^{(2)}(\mathbf{g}) = 1 - 2\mu_\varepsilon(\mathbf{g})/S_\varepsilon(\mathbf{g})$. Тогда $-1 \leqslant v_\varepsilon^{(2)} \leqslant 1$ для всех $\varepsilon > 0$, и вес будет линейно зависеть от площади $\mu_\varepsilon(\mathbf{g})$. Поэтому будем называть вес $v_\varepsilon^{(2)}$ и соответствующую оценку кривизны $k_\varepsilon^{(2)}$ линейными, а вес $v_\varepsilon^{(1)}$ и оценку $k_\varepsilon^{(1)}$ — нелинейными. Вес $v_\varepsilon^{(1)}$ рассматривался еще в работе [4].

Задача оптимального нахождения весовой функции. Задачу определения весовой функции v_ε как функции от площади μ_ε можно сформулировать в общем виде. А именно, вес v_ε кривой Γ в фиксированной точке $\mathbf{g}$ можно определить с помощью некоторой непрерывной монотонно возрастающей функции $\varphi(t)$, $0 \leqslant t \leqslant 1$, удовлетворяющей условиям:

а) $0 \leqslant \varphi(t) \leqslant 1$;

б) $\varphi(0) = 0$, $\varphi(1) = 1$.

Тогда $v_\varepsilon(\mathbf{g}) = \varphi\big(\big|2\frac{\mu_\varepsilon}{S_\varepsilon} - 1\big|\big)$. Например, вес $v_\varepsilon^{(2)}$ определяется с помощью функции $\varphi(t) = t$, а вес $v_\varepsilon^{(1)}$ определяется с помощью функции $\varphi(t)=\frac{2t}{1+t}$. Поскольку функция веса используется для нахождения оценки кривизны, необходимо, чтобы малому изменению площади μ_ε соответствовало бы и малое изменение веса, т. е. $\max\limits_{0\leqslant t\leqslant 1} \varphi'(t) \leqslant h$, где $h > 0$ — некоторое пороговое значение.

Предположим, что кривая, вес которой в заданной точке мы вычисляем, подвергнута вероятностному зашумлению. В этом случае площадь μ_ε будет случайной величиной, а вес будет функцией φ случайной величины $|2\mu_\varepsilon - S_\varepsilon|$. За счет выбора функции φ может быть уменьшена случайная ошибка вычисления веса. Возникает задача нахождения такой функции φ, которая минимизировала бы функционал дисперсии функции случайной величины

$$F_f(\varphi) = \int\limits_0^1 \varphi^2\big(|2t-1|\big)\tilde{f}(t)dt - \left(\int\limits_0^1 \varphi\big(|2t-1|\big)\tilde{f}(t)dt\right)^2,$$

где $f(x)$ — функции плотности распределения случайной площади M_ε, $\tilde{f}(t) = S_\varepsilon f(S_\varepsilon t)$.

Пример 1. Будем искать решение оптимизационной задачи в классе рациональных выпуклых вверх функций вида $\varphi(t) = \frac{at+bt^2}{1+ct}$, $c \geqslant 0$. Тогда выполняются условия $\varphi(0) = 0$ и $\varphi(1) = 1$, если $a + b = 1 + c$. Так как $\varphi''(t) = \frac{2(b-ac)}{(1+ct)^3}$, то $b \leqslant ac$ и условие $0 \leqslant \varphi'(t) \leqslant h$, $t \in (0, 1)$, равносильно оценкам: $\varphi'(0) \leqslant h$, $\varphi'(1) \geqslant 0$. Предположим, что кривая подвергнута такому вероятностному зашумлению, что случайная площадь M_ε будет распределена по нормальному закону с параметрами $\mathsf{E}[\mathrm{M}_\varepsilon] = \lambda S_\varepsilon$, $0 < \lambda < 1$ и $\sigma[\mathrm{M}_\varepsilon] = \delta S_\varepsilon$, $0 < \delta < 1$. Параметр λ характеризует кривизну кривой в данной точке: если $\lambda \approx 0{,}5$, то кривизна будет близка к нулю, а если $|\lambda - 0{,}5| \approx 0{,}5$, то в данной точке кривая имеет большую кривизну. Тогда $\tilde{f}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\delta}\exp\left(-\frac{(t-\lambda)^2}{2\delta^2}\right)$. Результаты минимизации

Таблица 1. Зависимость коэффициентов оптимальной весовой функции от кривизны.

λ	2/9	4/9	6/9	8/9
a	2	1	1	2
b	0,115	0	0	0
c	1,115	0	0	1

функционала $F_f(\varphi)$ при $\delta = \frac{1}{30}$, $h = 2$ и разных значений λ представлены в таблице 1.

Из таблицы видно, что при $\lambda \approx 0{,}5$ (малая кривизна) предпочтительно для вычисления веса использовать линейную функцию $\varphi(t) = t$, а при $|\lambda - 0{,}5| \approx 0{,}5$ (кривизна велика) — нелинейную функцию $\varphi(t) = 2t/(1+t)$.

Систематическая ошибка оценки кривизны в МГС

Для простоты будем рассматривать ε-окрестность точки, в которой оценивается кривизна кривой, в равномерной метрике $\rho_\infty(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \max\{|x_1 - y_1|, |x_2 - y_2|\}$. Приведем результаты о систематической ошибке оценки кривизны, вычисленной с помощью МГС.

Теорема 1. *Если в ε-окрестности точки $\mathbf{g}$ кривая задана явной функцией $y(x)$, имеющей третью производную, и удовлетворяет условию $2\varepsilon^2 q + \varepsilon k(\mathbf{g}) \leqslant 2$, где $q = \frac{1}{6}\sup\{|y'''(\xi)| : \xi \in [-\varepsilon,\varepsilon]\}$, то*

$$v_\varepsilon^{(1)}(\mathbf{g}) = \frac{|\mu_\varepsilon(\mathbf{g}) - \bar\mu_\varepsilon(\mathbf{g})|}{\max\{\mu_\varepsilon(\mathbf{g}), \bar\mu_\varepsilon(\mathbf{g})\}} = \frac{1}{3}k(\mathbf{g})\varepsilon + o(\varepsilon),$$
$$v_\varepsilon^{(2)}(\mathbf{g}) = \left|1 - \frac{2\mu_\varepsilon(\mathbf{g})}{S_\varepsilon(\mathbf{g})}\right| = \frac{1}{6}k(\mathbf{g})\varepsilon + o(\varepsilon), \quad \varepsilon \to 0.$$

Таким образом, в качестве оценки кривизны можно взять величины, равные

$$k_\varepsilon^{(1)}(\mathbf{g}) = \frac{3v_\varepsilon^{(1)}(\mathbf{g})}{\varepsilon}, \quad k_\varepsilon^{(2)}(\mathbf{g}) = \frac{6v_\varepsilon^{(2)}(\mathbf{g})}{\varepsilon}. \qquad (1)$$

Следствие 1. *Для систематических ошибок вычисления оценок кривизны в точке $\mathbf{g} \in \Gamma \in C^3$ по формулам (1) справедливы неравенства*

$$\left|k(\mathbf{g}) - k_\varepsilon^{(1)}(\mathbf{g})\right| \leqslant \frac{3q}{2}\varepsilon + \frac{k^2(\mathbf{g})}{6}\varepsilon + \frac{k^3(\mathbf{g})}{36}\varepsilon^2 + o(\varepsilon^2),$$
$$\left|k(\mathbf{g}) - k_\varepsilon^{(2)}(\mathbf{g})\right| \leqslant \frac{3q}{2}\varepsilon, \quad \varepsilon \to 0. \qquad (2)$$

Из (2) видно, что систематическая ошибка оценки $k_\varepsilon^{(1)}$ может быть больше систематической ошибки оценки $k_\varepsilon^{(2)}$. С другой стороны, величина систематической ошибки вычисления оценок кривизны в МГС практически совпадает с величиной систематической ошибки оценки кривизны локально-интерполяционным методом с усреднением [2].

Смещение и случайная ошибка оценки кривизны в МГС

Предположим теперь, что кривая Γ подвергнута вероятностному зашумлению. В этом случае вес и кривизна в фиксированной точке этой кривой будут случайными величинами. Найдем и оценим числовые характеристики этих величин. Без ограничения общности можно предположить, что кривая Γ проходит через начало координат, а вес и кривизна рассматриваются в точке $\mathbf{o}$ — начале координат. Будем рассматривать вычисление веса и кривизны в m-окрестности начала координат $U_m = U_m(\mathbf{o}) = [-m,m]^2$, $m \in \mathbb{N}$, в равномерной метрике. Пусть Γ — оцифрованная кривая, которая является границей плоской фигуры, составленной из прямоугольников, построенных на разбиении $-m < \cdots < m$ отрезка $[-m,m]$ с высотами $g_{-m},\ldots,g_m$ соответственно. Тогда Γ в окрестности U_m определяется множеством точек $\Gamma = \{\mathbf{g}_k\}_{k=-m}^m$, $\mathbf{g}_k = k\mathbf{i} + g_k\mathbf{j}$, $k = -m,\ldots,m$, причем $g_0 = 0$.

Предположим, что оцифрованная кривая $\Gamma = \{\mathbf{g}_k\}_{k=-m}^m$ подвергнута одномерному целочисленному некоррелированному зашумлению, в результате получим случайную кривую $\tilde\Gamma = \{\mathbf{G}_k\}_{k=-m}^m$, $\mathbf{G}_k = k\mathbf{i} + G_k\mathbf{j}$, $k = -m,\ldots,m$. Здесь G_k — независимые случайные величины, принимающие целочисленные значения g_k, $g_k \pm 1,\ldots,g_k \pm l$ с вероятностями p_0, $p_{\pm1},\ldots,p_{\pm l}$ соответственно ($\sum_{s=-l}^{l} p_s = 1$, $p_s = p_{-s}$, $s = 1,\ldots,l$, где l — размах зашумления). Тогда $\mathsf{E}[G_k] = g_k$ и $\sigma^2 = \sigma^{\mathbf{2}}[G_k] = 2\sum_{s=1}^{l} s^2 p_s$, $k = -m,\ldots,m$. Поскольку вес вычисляется в начале координат $\mathbf{o} \in \tilde\Gamma = \{\mathbf{G}_k\}_{k=-m}^m$, то $G_0 = 0$ — неслучайная величина.

Пусть $\mu_m(\Gamma)$ — площадь области, расположенную с одной стороны от оцифрованной кривой Γ в пределах окрестности U_m. Тогда $\mu_m(\tilde\Gamma)$ — случайная величина. Пусть размер m «окна» U_m удовлетворяет условию $\max\limits_{-m\leqslant k\leqslant m} |g_k| \leqslant m - l$, $m > l$, которое гарантирует, что при любой реализации зашумления кривая не выйдет за пределы «окна». Тогда $\mu_m(\Gamma) = \sum_{k=-m}^{m}(g_k + m)$. Смещение вычисления случайного веса $V_m^{(2)} = 1 - \frac{2\mu_m(\tilde\Gamma)}{\mu(U_m)}$ и случайной оценки кривизны $K_m^{(2)} = \frac{6V_m^{(2)}}{m}$ будут равны нулю, а для случайной ошибки будет справедливо следующее утверждение.

Утверждение 2. *Случайные ошибки вычисления веса $V_m^{(2)}$ и кривизны $K_m^{(2)}$ в случае указанного некоррелированного зашумления равны*

$$\sigma^{\mathbf{2}}\big[V_m^{(2)}\big] = \frac{\sigma^2}{2m^3}, \quad \sigma^{\mathbf{2}}\big[K_m^{(2)}\big] = \frac{18\sigma^2}{m^5}. \qquad (3)$$

Для нелинейной оценки кривизны верны следующие результаты [5]. Пусть $h(l,m) = \frac{2(l(2m-1)-1)}{2m^2+l(2m-1)-1}$,

$\sigma_m^2\big(\tilde{\Gamma}\big)=\sigma^{\mathbf{2}}\big[\mu_m(\tilde{\Gamma})\big]=2m\sigma^2$, $C_1(h)=\frac{(2-h)^2}{2h}$, $C_2(h)=\frac{(2-h)^2(22-7h)}{36(2+h)}$.

Теорема 3. *Пусть оцифрованная кривая* Γ *подвергнута указанному некоррелированному зашумлению и* $v_m^{(1)}\geqslant h>h(l,m)$. *Тогда*

$$b\big[K_m^{(1)}\big]:=k_m^{(1)}-\mathsf{E}\big[K_m^{(1)}\big]\leqslant 3C_1(h)\frac{\sigma_m\big(\tilde{\Gamma}\big)}{m^3}. \qquad (4)$$

Теорема 4. *Пусть оцифрованная кривая* Γ *подвергнута указанному некоррелированному зашумлению и* $v_m^{(1)}\geqslant h>h(l,m)$. *Тогда*

$$\frac{9\sigma_m^2\big(\tilde{\Gamma}\big)}{16m^6}\left(1-\frac{(2-h)^4}{16h^2m^4}\sigma_m^2\big(\tilde{\Gamma}\big)\right)\leqslant\sigma^{\mathbf{2}}\big[K_m^{(1)}\big]\leqslant \frac{9\sigma_m^2\big(\tilde{\Gamma}\big)}{m^6}\left(C_2(h)-\frac{\sigma_m^2\big(\tilde{\Gamma}\big)}{256m^4}\right). \qquad (5)$$

Из (5) видно, что случайная ошибка $\sigma^{\mathbf{2}}\big[K_m^{(1)}\big]$ меньше ошибки $\sigma^{\mathbf{2}}\big[K_m^{(2)}\big]$. А условие $\sigma^{\mathbf{2}}\big[K_m^{(1)}\big]=O(m^{-5})$ гарантирует устойчивость метода к зашумлению и значительно лучше соответствующих характеристик локально-интерполяционных методов с усреднением [2] или со сглаживанием [3], для которых $\sigma^{\mathbf{2}}\big[K_m\big]=O(m^{-2})$.

Нахождение оптимальных значений размера «окна»

Пусть $k>0$ — точное значение кривизны гладкой кривой Γ в начале координат. Предположим, что вычисляется кривизна оцифрованного изображения этой кривой в случае одномерного некоррелированного целочисленного зашумления. Рассмотрим задачу нахождения оптимального размера окна m в случаях вычисления линейной $k_m^{(2)}$ и нелинейной $k_m^{(1)}$ оценок кривизны в МГС.

Линейная оценка кривизны. Рассмотрим среднеквадратичную погрешность $S^{(2)}(m)=\big(\bar{s}_m^{(2)}\big)^2+\sigma^2\big[K_m^{(2)}\big]$ вычисления линейной оценки кривизны $k_m^{(2)}$ в МГС, где (см. (2) и (3)) $\bar{s}_m^{(2)}=\frac{3}{2}qm$ — верхняя оценка систематической ошибки оценки кривизны, $\sigma^2\big[K_m^{(2)}\big]=\frac{18\sigma^2}{m^5}$ — случайная ошибка оценки кривизны. Оптимальное значение $m_0^{(2)}$ размера окна, при котором суммарная ошибка $S^{(2)}$ будет минимальной, равно $m_0^{(2)}=\left[\sqrt[7]{\frac{20\sigma^2}{q^2}}\right]$. Причем $S^{(2)}(m_0^{(2)})=3{,}15\sqrt[7]{400}q^{\frac{10}{7}}\sigma^{\frac{4}{7}}$. Так как $y'''(\xi)\approx k'(\xi)$ при $\xi\approx 0$, то уточнение размера «окна» m при вычислении линейной оценки кривизны в МГС можно осуществлять следующим образом. Если $K_{m_i}^{(2)}(\mathbf{g}_i)$ — оценка кривизны, вычисленная МГС в «окне» размером m_i, то будем вычислять m_{i+1} по формуле

$$m_{i+1}=\left[c\left(\frac{\rho(\mathbf{g}_i,\mathbf{g}_{i-1})}{\big|K_{m_i}^{(2)}(\mathbf{g}_i)-K_{m_{i-1}}^{(2)}(\mathbf{g}_{i-1})\big|}\right)^{\frac{2}{7}}\right],$$

где $c=\sqrt[7]{720\sigma^2}$.

Нелинейная оценка кривизны. Среднеквадратичная погрешность $S^{(1)}(m)$ вычисления нелинейной оценки кривизны $k_m^{(1)}$ в МГС будет равна $S^{(1)}(m)=\big(\bar{s}_m^{(1)}\big)^2+\bar{b}^2\big[K_m^{(1)}\big]+\bar{\sigma}^2\big[K_m^{(1)}\big]$, где (см. (2), (4), (5)) $\bar{s}_m^{(1)}=\frac{1}{6}(k^2+9q)m$ — главная часть верхней оценки систематической ошибки оценки кривизны, $\bar{b}\big[K_m^{(1)}\big]=3\sqrt{2}C_1(h)\frac{\sigma}{m^{2.5}}$ — верхняя оценка смещения случайной оценки кривизны, $\bar{\sigma}^2\big[K_m^{(1)}\big]=18C_2(h)\frac{\sigma^2}{m^5}$ — верхняя оценка случайной ошибки оценки кривизны. Оптимальное значение $m_0^{(1)}$ размера «окна», при котором суммарная ошибка $S^{(1)}$ будет минимальной, равно $m_0^{(1)}=\left[\sqrt[7]{\frac{1620(C_1^2(h)+C_2(h))\sigma^2}{(k^2+9q)^2}}\right]$. Причем $S^{(1)}(m_0^{(1)})=\frac{7}{60}\sqrt[7]{1200}(k^2+9q)^{\frac{10}{7}}\sigma^{\frac{4}{7}}(C_1^2(h)+C_2(h))^{\frac{2}{7}}$. Сравнивая значения $S^{(1)}(m_0^{(1)})$ и $S^{(2)}(m_0^{(2)})$ можно сделать следующий вывод: выбор линейной оценки кривизны предпочтителен тогда, когда невелика измеряемая кривизна. В противном случае, лучше использовать нелинейную оценку кривизны.

Выводы

Бинарный аналог метода Харриса — МГС может быть реализован с помощью процедуры вычисления весовой функции. Причем, если оцениваемая кривизна априорно мала, то предпочтительно использовать линейную функцию веса, в противном случае — нелинейную функцию. Оценка кривизны, полученная МГС, будет иметь случайную ошибку при вероятностном зашумлении кривой, которая значительно меньше соответствующих характеристик локально-интерполяционных методов.

Литература

[1] *Harris C., Stephens M.A.* Combined Corner and Edge Detector // Proc. Fourth Alvey Vision Conference, 1988 — P. 147–151.

[2] *Лепский А.Е.* Оценка кривизны методом усреднения локально-интерполяционных оценок // Сборник докладов 14-й Всероссийской конференции «Математические методы распознавания образов», М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 387–390.

[3] *Лепский А.Е.* Оценка кривизны методом аналитического сглаживания локально-интерполяционных оценок // Сборник докладов 14-й Всероссийской конференции «Математические методы распознавания образов», М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 391–394.

[4] *Каркищенко А.Н., Лепский А.Е., Безуглов А.В.* Об одном способе векторного и аналитического представления контура изображения // Изв. ТРТУ. «Мат-лы Всерос. науч.-техн. конф. «Интел. САПР-97», Таганрог: ТРТУ, 1998. — Т. 8, № 2. — С. 107–111.

[5] *Лепский А.Е.* Об устойчивости центра масс векторного представления в одной вероятностной модели зашумления контура изображения // Автоматика и телемеханика, — 2007. — № 1. —С. 82–92.

Многолистная многоугольная фигура и ее скелет*

Мехедов И. С.
mehedov@mail.ru
Москва, Вычислительный центр им. Дородницына РАН

В статье определяется понятие многолистной многоугольной фигуры (ММФ) и ее скелета для обобщения и формализации понятия склейки скелетов смежных многоугольных фигур. Такие геометрические конструкции позволяют разработать математические модели геоинформатики, в частности, для описания топологии улично-дорожной сети, содержащей развязки, в виде связного графа осевых линий дорог, мостов, тоннелей.

Polygonal multifigure and its skeleton*

Mekhedov I. S.
Dorodnicyn Computing Center of RAS, Moscow, Russia

The definitions of a polygonal multifigure and its skeleton are presented in the paper to generalize the concept of the fusing operation on skeletons of polygonal figures sharing a common polygonal chain. Such geometric constructions are used to develop mathematical models in geoinformatics, in particular to describe of street network with interchanges as a connected graph of road, bridge and tunnel centerlines.

Для описания формы плоского объекта широко используется *скелетное представление фигуры. Скелет* (по-другому, серединная ось фигуры) представляет собой линию, равноудаленную от границ фигуры. Более строго, скелет является геометрическим местом центров максимальных вписанных в фигуру окружностей [3]. Скелет допускает интерпретацию в виде плоского графа. Топологические особенности этого графа отражают общую структуру объекта.

Скелетное представление векторных объектов используется в геоинформатике, в частности, для построения топологической модели улично-дорожной сети в виде связного графа осевых линий дорог, мостов и тоннелей по векторному описанию контуров обочин [5]. Метод основан на объединении всех векторных многоугольных фигур, соответствующих участкам улично-дорожной сети на карте, и скелетизации полученного объединения.

Данный метод, однако, неприменим к участкам улично-дорожной сети, содержащим развязки, поскольку объединение перекрывающихся многоугольных фигур, находящихся на разных уровнях (например, дорога и мост над ней), приводит к потере информации о топологии (рис. 2е). Такие участки можно интерпретировать, с одной стороны, как плоский гомеоморфный образ двумерного многообразия с краем в трехмерном пространстве (рис. 1). С другой стороны, такую геометрическую конструкцию можно интерпретировать как многоугольную фигуру с самоналожениями (при этом ломаные, образующие контура фигуры, могут иметь самопересечения) (рис. 6г).

В [1] был предложен подход к построению скелета такого двумерного многообразия на основе операции склейки скелетов его плоской изометричной проекции. В [2] была описана бинарная операция склейки скелетов многоугольных фигур, имеющих общий участок границы. Операция склейки скелетов отдельных многоугольных фигур без объединения самих фигур дает возможность построения «объединенного скелета» (рис. 2в). Получаемая при этом геометрическая конструкция является реализацией графа (возможно, непланарного), на основе которого строится модель улично-дорожной сети, содержащей развязки (рис. 2д). Однако, строгой математической модели для такого «объединенного скелета» разработано не было.

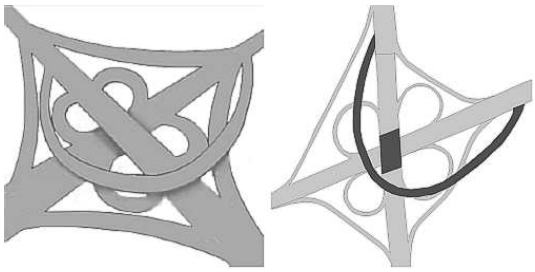


Рис. 1. Двумерное многообразие с краем в трехмерном пространстве — модель развязки (слева) и его гомеоморфный образ на плоскости — представление развязки в двумерной векторной карте (справа).

В настоящей статье преследуется две цели.

1. Формализация определения геометрической конструкции (называемой далее *многоугольной многолистной фигурой*), интерпретируемой как гомеоморфный образ двумерного многообразия с краем в трехмерном пространстве (а также как многоугольная фигура с самоналожениями);

2. Определение скелета такой конструкции, интерпретируемого как «объединенный скелет» многоугольных фигур, имеющих общий участок границы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 08-01-00670.

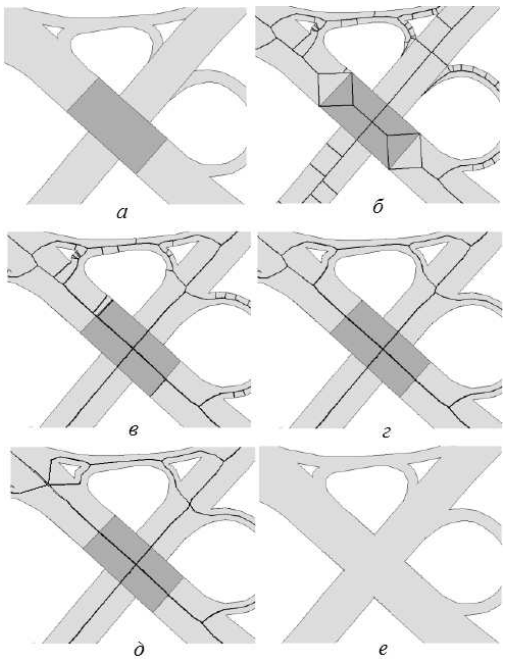


Рис. 2. Построение топологической модели улично-дорожной сети, содержащей развязки. Исходные данные (рис. ***а***), скелетизация отдельных многоугольных фигур (рис. ***б***), склейка скелетов многоугольных фигур, имеющих общий участок границы (рис. ***в***), «стрижка» полученной скелетной конструкции (рис. ***г***), преобразование скелетной конструкции к требуемой модели (рис. ***д***). Объединение всех многоугольных фигур как множеств точек ведет к потере содержательной информации о топологии развязки (рис. ***е***).

Многолистная многоугольная фигура

Определение 1. *Назовем две многоугольные фигуры*[1] P_1 *и* P_2 *на плоскости смежными, если в их пересечении присутствуют конечное ненулевое число невырожденных отрезков (отношение смежности будем обозначать символом* $|$*).*

Примеры смежных и несмежных многоугольных фигур приведены на рис. 3.

Рассмотрим некоторое множество многоугольных фигур $\mathcal{P} = \{P_1, \ldots, P_n\}$.

Определение 2. *Будем говорить, что множество* $\mathcal{P}$ *обладает свойством смежной связности, если для любых двух фигур* $P_i, P_j \in \mathcal{P}$, $1 \leqslant i \neq j \leqslant n$ *найдется упорядоченная последовательность фигур* $(P_{i_1}, P_{i_2}, \ldots, P_{i_k}), P_{i_k} \in \mathcal{P}, 1 \leqslant k \leqslant n$ *такая, что* $i = i_1$, $j = i_k$ *и* $P_{i_1} \mid P_{i_2}$, $P_{i_2} \mid P_{i_3}, \ldots, P_{i_{k-1}} \mid P_{i_k}$.

Свойство смежной связности проиллюстрировано на рис. 4.

Пусть фигуры $P_i, P_j \in \mathcal{P}$ смежные. Обозначим $\{l_{ij}\} = \{l_{ij}^1, \ldots, l_{ij}^m\}$ множество невырожденных отрезков в пересечении P_i и P_j.

[1]Под *многоугольной фигурой* будем понимать часть плоскости, ограниченную конечным числом простых замкнутых непересекающихся ломаных.

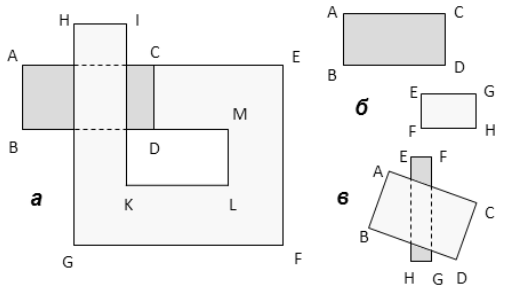


Рис. 3. Смежные многоугольные фигуры. Многоугольники $ABCD$ и $CEFGHIKLMD$ являются смежными (рис. ***а***), в то время как многоугольники $ABCD$ и $EFGH$ на рис. ***б*** и рис. ***в*** — нет.

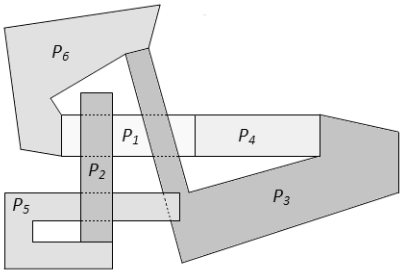


Рис. 4. Свойство смежной связности. Множества $\mathcal{P}_1 = \{P_1, P_3, P_4, P_6\}$ и $\mathcal{P}_2 = \{P_2, P_5\}$ обладают свойством смежной связности, в то время как множество $\mathcal{P}_3 = \{P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6\}$ — нет.

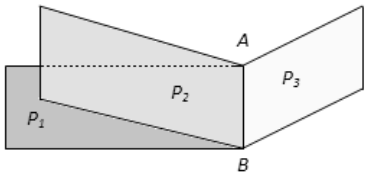


Рис. 5. Свойство смежной однозначности. Свойство смежной однозначности нарушено для множества $\mathcal{P} = \{P_1, P_2, P_3\}$, поскольку все три фигуры имеют в пересечении невырожденный отрезок AB.

Определение 3. *Будем говорить, что множество* $\mathcal{P}$ *обладает свойством смежной однозначности, если для любой тройки элементов* P_i, P_j, P_k *из множества* $\mathcal{P}$ *таких, что* $P_i \mid P_k, P_j \mid P_k$, *пересечение каждого из отрезков множества* $\{l_{ik}\}$ *с каждым из отрезков множества* $\{l_{jk}\}$ *пусто либо состоит из одной точки.*

На рис. 5 приведен пример множества многоугольных фигур, организованных в виде «страниц в книге» и не обладающего свойством смежной однозначности.

Рассмотрим многоугольную фигуру P на плоскости и многолистную функцию $i\colon P \to \mathbb{N}$, определенную на множестве точек фигуры и принимающую только натуральные значения. Обозначим $\mathcal{I}$ множество значений функции i, а $\mathcal{I}(p)$ — множество значений функции i в точке $p \in P$.

Определение 4. *Упорядоченная пара $C = (P, i)$ называется многолистной многоугольной фигурой (ММФ), если:*

1) $\mathcal{I} = \{i_1, i_2, \ldots, i_n\}$ *конечно и непусто;*
2) $\forall k = 1, \ldots, n \Rightarrow P_k = \{p \in P\colon i_k \in \mathcal{I}(p)\}$ — *многоугольная фигура (другими словами, для любого k, множество точек ММФ, в которых функция i принимает значение i_k, является многоугольной фигурой);*
3) $P_1 \cup P_2 \cup \ldots \cup P_n = P$;
4) *Множество $\mathcal{P} = \{P_1, \ldots, P_n\}$ обладает свойствами смежной связности и смежной однозначности.*

Таким образом, функция i порождает множество многоугольных фигур $\mathcal{P} = \{P_1, \ldots, P_n\}$, каждая из которых является подмножеством точек фигуры P, при этом существует взаимнооднозначное соответствие между множествами $\mathcal{P}$ и $\mathcal{I}$, кроме того, объединение всех фигур множества $\mathcal{P}$ совпадает с фигурой P, а само множество $\mathcal{P}$ обладает свойствами смежной связности и смежной однозначности. Пример ММФ приведен на рис. 6.

Более того, любое множество многоугольных фигур $\mathcal{P} = \{P_1, \ldots, P_n\}$, обладающее свойствами смежной связности и смежной однозначности, определяет ММФ (P, i). Для этого достаточно положить $P = P_1 \cup \ldots \cup P_n$, а i определить следующим образом: $k \in \mathcal{I}(p) \Leftrightarrow p \in P_k,\ 1 \leqslant k \leqslant n$.

Мощность множества значения функции i назовем *листностью* ММФ.

Ввиду ограничения объема статьи, строгое определение объединения двух ММФ здесь не приводится, однако на понятийном уровне определение можно дать следующим образом: *объединением* ММФ (P_1, i_1) и (P_2, i_2) (обозначение: $\cup$) назовем такую пару (P_3, i_3), где P_3 — множество точек плоскости, а $i\colon P_3 \to \mathbb{N}$ — многолистная функция, что $P_3 = P_1 \cup P_2$, а i_3 — некоторая многолистная функция, зависящая определенным образом образом от i_1 и i_2.

Заметим, что объединение двух ММФ вовсе не обязательно будет ММФ. Критерий того, что при объединении двух ММФ вновь получается ММФ, формулируется в следующей лемме.

Пусть $C_1 = (P_1, i_1)$ и $C_2 = (P_2, i_2)$ — две ММФ, $\mathcal{P}_1$ и $\mathcal{P}_2$ — множества многоугольных фигур, порождаемые функциями i_1 и i_2, соответственно. Пусть $C_3 = (P_3, i_3)$ — объединение C_1 и C_2.

Лемма 1. *C_3 — ММФ тогда и только тогда, когда множество $\mathcal{P}_1 \cup \mathcal{P}_2$ обладает свойствами смежной связности и смежной однозначности.*

Определение 5. *Две ММФ называются смежными, если их объединение является ММФ.*

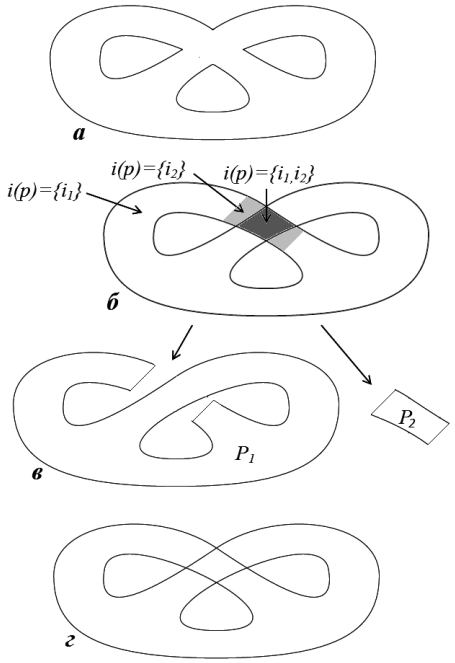


Рис. 6. Пример ММФ (P, i): многоугольная фигура P (рис. ***а***), функция i, принимающая значение i_1 в точках белого цвета, значение i_2 — в точках светло-серого цвета, и значения i_1 и i_2 одновременно — в точках темно-серого цвета (рис. ***б***), многоугольные фигуры P_1 и P_2, порождаемые функцией i (рис. ***в***) и интерпретация ММФ как многоугольной фигуры с самоналожениями (рис. ***г***).

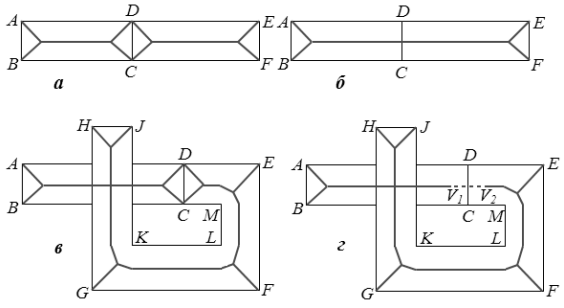


Рис. 7. Склейка скелетов смежных многоугольных фигур. Рис. ***а***: многоугольники $ABCD$ и $CDEF$, пересекающиеся по отрезку CD и их скелеты; рис. ***б***: объединенный скелет этих многоугольников; рис. ***в***: частично перекрывающиеся многоугольники $ABCD$ и $CDEFGHJKLM$, имеющие общую сторону CD; рис. ***г***: объединенный скелет этих многоугольников.

Скелет многолистной многоугольной фигуры

В [1, 2] описана бинарная операция над скелетами смежных многоугольных фигур — *склейка* скелетов, а также был приведен алгоритм склейки. Результатом такой операции является *объединенный скелет* двух смежных многоугольных фигур.

Склейка скелетов S_1 и S_2 многоугольных фигур P_1 и P_2 основана на слиянии их *графов смеж-*

ности DG_1 и DG_2 (понятие графа смежности многоугольной фигуры введено в [4]). Склейка скелетов позволяет построить объединенный скелет двух многоугольных фигур, имеющих общий участок границы (или несколько таких участков). При этом, если фигуры перескаются только по границе (рис. 7а), то объединенный скелет совпадает со скелетом их объединения как множеств точек (рис. 7б). Если же смежные многоугольные фигуры имеют перекрывающиеся части (рис. 7в), то построенный объединенный скелет (рис. 7г) войдут те части исходных скелетов, которые не связаны с общей границей смежных фигур. Также в объединенный скелет войдут новые ветви, «сращивающего», «склеивающего» эти части (такая сращивающая ветвь обозначена V_1V_2 на рис. 7г). Объединенный скелет является реализацией графа (возможно, непланарного). Склейка скелетов обозначается знаком $\oplus$: $S(P_1) \oplus S(P_2)$.

Дадим обобщение и формализацию операции склейки скелетов и понятия объединенного скелета в терминах ММФ и ее скелета. Если рассмотреть две многоугольные фигуры как ММФ листности 1, то их объединение как ММФ, с одной стороны, определено, а с другой — сохраняет информацию о топологии в терминах смежной связности и смежной однозначности исходных многоугольных фигур. Более того, объединенный скелет таких многоугольных фигур, определенный ранее как результат операции склейки, можно теперь определить как скелет ММФ.

Пусть $C = (P, i)$ — ММФ, $\mathcal{P} = \{P_1, \ldots, P_n\}$ — множество многоугольных фигур, порождаемое функцией i, пусть $l = |\mathcal{I}|$ — листность C. Обозначим $S(P)$ скелет P, $\sigma(C)$ — скелет ММФ C.

Определение 6. $l = 1 \Rightarrow \sigma(C) = S(P)$.

Определение 7. $l = 2 \Rightarrow \sigma(C) = S(P_1) \oplus S(P_2)$.

Определение 8. *Склейкой скелетов двух смежных ММФ листности 1 называется скелет их объединения (будем обозначать склейку также символом* $\oplus$*).*

Замечание 1. Корректность определения следует из коммутативности операции склейки смежных многоугольных фигур.

Замечание 2. Скелет ММФ (P, i) произвольной листности может быть рекурсивно определен через объединение ММФ с помощью операции склейки многоугольных фигур, порождаемых функцией i. При этом отметим, что операция склейки скелетов смежных ММФ обладает, в общем случае, свойствами ассоциативности и коммутативности.

На рис. 8 изображен скелет для ММФ из рис. 6, построенный описанным выше алгоритмом склейки.

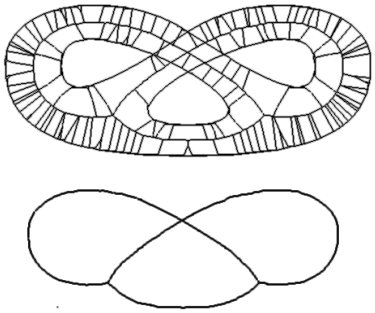


Рис. 8. Вверху: ММФ из рис. 6 и ее скелет. Внизу: скелет после рекурсивного удаления тупиковых ветвей.

Выводы

В данной работе формализовано определение геометрической конструкции — многолистной многоугольной фигуры, являющейся математической моделью развязки на векторной карте, представленной совокупностью контуров обочин. Определено понятие скелета ММФ как формализации понятия «объединенный скелет смежных многоугольных фигур», на основе которого строится топологическая модель улично-дорожной сети, содержащей развязки, в виде связного графа осевых линий дорог, мостов и тоннелей. Полученные результаты позволяют использовать строгие математические модели при решении актуальных задач геоинформатики, требующих интегрального анализа формы объектов. Причем, исходные данные в таких задачах состоят из десятков тысяч многоугольных фигур, особенности взаимного расположения которых не позволяют применять стандартные алгоритмы анализа формы, основанные на скелетизации.

Литература

[1] *Mekhedov I., Mestetskiy L.* Skeleton of a Multi-ribbon Surface // Lecture Notes In Computer Science: 10th International Conference on Computational Science and Its Applications – ICCSA 2010. — Springer-Verlag, 2010. — Vol. 6016/2010. — Pp. 557–573.

[2] *Mekhedov I.,Mestetskiy L.* The Fusion as a Novel Binary Operation on Medial Axes // 2010 International Symposium on Voronoi Diagrams in Science and Engeneering. — IEEE Computer Society, 2010. — Pp. 67–73.

[3] *Местецкий Л. М.* Непрерывная морфология бинарных изображений. Фигуры. Скелеты. Циркуляры. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 288 с.

[4] *Местецкий Л. М.* Скелетизация многоугольной многосвязной фигуры на основе дерева смежности ее границы. // Сибирский журнал вычислительной математики — 2006. — Т. 9, № 3. — С. 299–314.

[5] *Мехедов И. С.,Козлов А. В.* Модель улично-дорожной сети на основе скелета // Сборник докладов 19-й международной конференции по компьютерной графике и машинному зрению «Графикон-2009», М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 356–359.

Восстановление формы трехмерного объекта по двум плоским проекциям с использованием стековых морфологических деревьев*

Стреляев В. С.[1]***, Копылов А. В.***[1]***, Визильтер Ю. В.***[2]
bazilstrel@gmail.com, and.kopylov@gmail.com, viz@gosniias.ru
Тула, Тульский государственный университет[1]; Москва, ФГУП «ГосНИИАС»[2]

В данной статье предложен метод восстановления формы трехмерного объекта, основанный на использовании стековых морфологических дескрипторов. Данный метод предполагает представление изображения в виде древовидной структуры, сохраняющей его яркостные и топологические особенности. Кроме того, такое представление позволяет реализовать вычислительно эффективный алгоритм глобального стерео отождествления на основе динамического программирования.

Reconstruction of 3D-object shape by two plane projections using stack morphological trees*

Strelyaev V. S.[1]***, Kopylov A. V.***[1]***, Vizilter Yu. V.***[2]
Tula State University[1], Tula, Russia; FSUE "SRIAS"[2], Moscow, Russia

This paper introduces a new method of 3D-object shape reconstruction using stack morphological descriptors. This method implies a tree representation of the image which retains its topological and brightness features. It also makes it possible to use an effective dynamic programming-based global stereo matching method.

Введение

Морфологический подход к анализу изображений представляет собой унифицированную схему, позволяющую использовать при решении разных типов задач анализа изображений единый тип алгоритмов, непосредственно связанных с соответствующими моделями изображений. В силу сходства основных идей этого подхода с идеями морфологических теорий Серра и Пытьева, данный подход был назван морфологическим подходом к анализу изображений [1].

С самой общей точки зрения морфологический анализ изображений отличается от других схем тем, что в качестве обязательного этапа предполагает сегментацию изображений, допускающую их последующую полную или частичную реконструкцию. Иными словами, в морфологическом подходе обязательным этапом решения любого типа задач является оптимальное построение модельного описания скрытого прообраза наблюдений.

Одним из самых распространенных способов представления изображений является четырехсвязная двумерная решетка пикселей. Однако алгоритмы точного решения оптимизационных задач на решетках требуют слишком больших вычислительных затрат, чтобы быть применимыми к реальным задачам. В то же время, использование древовидных структур позволяет находить точное решение за время, линейно зависящее от числа элементов изображения. В связи с этим, применяются различные способы замещения решетчатых структур древовидными, например при помощи квадродеревьев или других способов пирамидальной обработки [2]. С другой стороны, для представления морфологических свойств изображений может вводиться уровневая декомпозиция [3]. Использование стекового свойства таких декомпозиций позволяет представлять их с помощью древовидной структуры, называемой стековым деревом, которое, с одной стороны, сохраняет яркостные и топологические особенности изображения [4], а с другой стороны, допускает применение для построения оптимального описания эффективных в вычислительном плане процедур на основе древовидного динамического программирования [5].

В данной работе рассматривается применение подхода на основе стековых морфологических дескрипторов к задаче восстановления формы трехмерного объекта.

Задача восстановления формы трехмерного объекта

Задача восстановления формы трехмерного объекта возникает в системах технического зрения, биометрической идентификации, распознавания изображений и др.

Существуют различные классификации алгоритмов сопоставления двух изображений. Один из вариантов такой классификации представлен в [6]. Все алгоритмы делятся на локальные, в которых расхождение вычисляется в каждой точке на основе локального сходства участка изображения внутри окна вокруг этой точки и внутри окна вокруг точек на другом изображении, и глобальные, как правило, оптимизирующие некоторую глобальную целевую функцию, сочетающую данные, по-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 10-07-00489, № 09-07-13551-офи ц.

лученные непосредственно из пары изображений, и априорные предположения о гладкости результата обработки. Глобальные алгоритмы, в свою очередь, делятся по способу оптимизации целевой функции. Как правило, это моделируемый отжиг, различные варианты динамического программирования или нахождение минимального сечения графа. Алгоритмы сечения графа называют также двумерными. Они дают довольно точные результаты, но имеют меньшую производительность. Алгоритмы, обрабатывающие строки изображений независимо друг от друга, называют одномерными. Они работают быстрее, но подвержены эффекту гребенки, который устраняют с помощью различных эвристических приемов. Компромиссом по производительности и качеству являются алгоритмы оптимизации на поддереве графа, построенного на пикселях изображения.

Многие алгоритмы построены на модели марковских случайных полей (MRF). Основное предположение в такой модели: расхождение в любой точке зависит только от расхождений соседних точек (как правило, считают, что их 4, реже в рамках той же модели используется 8 точек). Поиск соответствия в них производится на основе сечения графа или распространения доверия.

В отличие от большинства алгоритмов восстановления формы 3D объекта, где основой является сравнение отдельных элементов изображений или их окрестностей, чаще всего прямоугольной формы, морфологический подход позволяет производить отождествление областей изображения, соответствующих структуре анализируемого объекта.

Для алгоритмической реализации двумерной критериальной морфологии предлагается использовать представление двумерных изображений в виде т. н. стековых деревьев. Такая структура обеспечивает полную реконструкцию растрового изображения, сохраняя при этом все его яркостные и топологические особенности [4].

Построение стекового дерева

Построение стекового дерева происходит следующим образом. Изображение рассматривается как двумерная функция $I(x, y)$, которая ставит в соответствие точке растра $(x, y) \in \Theta$, где Θ — множество пикселей изображения, значение интенсивности из интервала $[0; 1]$. Множество Θ разбивается на K срезов L_i следующим образом:

$$L_i[I] := \big\{(x, y) \in \Theta \mid I(x, y) \geqslant i/K\big\},$$

где $i = 0, \ldots, K - 1$.

Между такими срезами выполняется стековое свойство:

$$i > j \;\Rightarrow\; L_i[I] \subseteq L_j[I].$$

Если построить граф (G, T), вершины T которого соответствуют срезам, а ребра G соединяют те

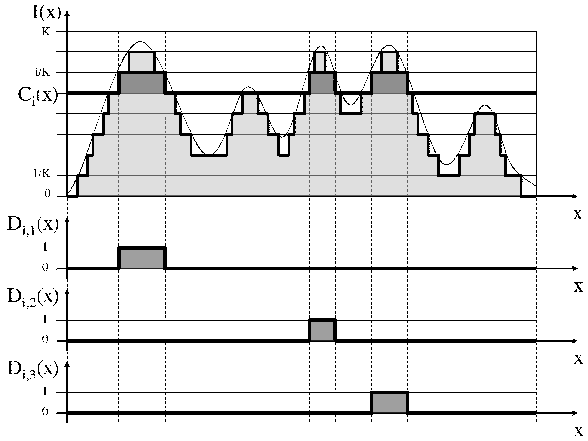


Рис. 1. Стековые сегменты одномерной функции.

вершины, между которыми выполняется стековое свойство, то такой граф будет иметь вид цепи.

Теперь, когда получено множество срезов, разобьем каждый срез L_i на несколько областей $A_{i,0}, A_{i,1}, \ldots A_{i,N_i-1}$ так, что для любых $(x', y') \in \in A_{i,j'}$ и $(x'', y'') \in A_{i,j''}$, $j' \neq j''$

$$| x' - x'' | + | y' - y'' | > 1.$$

Другими словами, внутри среза мы отделяем друг от друга замкнутые срезовые области. Случай одномерной функции показан на рис. 1, где срезы L_i и области $A_{i,j}$ представлены бинарными функциями

$$C_i(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \notin L_i; \\ 1, & \text{если } x \in L_i, \end{cases}$$

$$D_{i,j}(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \notin A_{i,j}; \\ 1, & \text{если } x \in A_{i,j}. \end{cases}$$

Между этими областями также выполняется стековое свойство:

$$A_{i,j'} \subseteq L_i,\; i > 0 \;\Rightarrow\; \exists A_{i-1,j''} \subseteq L_{i-1},\; A_{i,j'} \subseteq A_{i-1,j''}.$$

Поставим в соответствие каждой области $A_{i,j}$ вершину $t \in T$ некоторого графа. Две вершины t' и t'' из T соединены ребром $(t', t'') \in G$ тогда и только тогда, когда для соответствующих им областей A'_t и A''_t выполняется стековое свойство. Тогда граф (G, T), будет иметь вид дерева (рис. 2), называемого стековым деревом [4]. Процесс построения стекового дерева представляет собой операцию сегментации изображения. Обратная операция реконструкции состоит в объединении срезовых областей в направлении от корня дерева к листьям.

Формулировка оптимизационной задачи

Пусть необходимо восстановить форму трехмерного объекта по двум проекциям $I^1(x, y)$

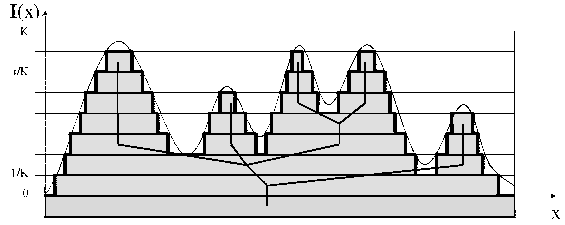


Рис. 2. Стековое дерево одномерной функции.

и $I^2(x,y)$, стековые деревья которых совпадают и определяются графом (G,T). Для использования морфологического подхода к анализу изображений необходимо построить оптимальное модельное описание скрытого прообраза наблюдений. В данном случае, для этого требуется сформировать критерий оптимального морфологического описания данных, имеющий смысл целевой функции [7].

С каждой вершиной $t \in T$ стекового дерева свяжем узловую функцию $\psi_t(v_t)$, которая определяет, насколько правдоподобно то, что некоторое яркостно-геометрическое преобразование с параметрами v_t наилучшим образом переводит область A_t^1 в соответствующую ей область A_t^2 парного изображения. Такая функция, в терминах критериальной морфологии, имеет смысл критерия соответствия наблюдений и их реконструкции.

Например, в задаче восстановления формы объекта в качестве яркостно-геометрического преобразования используется преобразование стереопроекции, переводящее точки одного изображения стереопары в соответствующие точки на картинной плоскости другого изображения. Параметрами такого преобразования являются внутренние и внешние параметры калибровки камер, а также глубина точки сцены, проекцией которой является данная точка опорного изображения.

Каждому ребру $(t',t'') \in G$ стекового дерева, в свою очередь, поставим в соответствие функцию связи $\gamma(v_{t'}, v_{t''})$, штрафующую расхождения в значениях параметров яркостно-геометрического преобразования. Эта функция отражает наши модельные представления о структуре изображения, и поэтому в терминах критериальной морфологии имеет смысл модельного критерия.

Тогда общий критерий оптимального морфологического описания данных минимизирует сумму всех узловых функций и функций связи.

$$\Phi(V) = \sum_{t\in T} \psi_t(v_t) + \sum_{(t',t'')\in G} \gamma(v_{t'}, v_{t''}) \to \min(V),$$

где $V = \{v_t, t \in T\}$, $v_t \in \mathscr{V}$ — набор векторов параметров яркостно-геометрического преобразования для всех вершин $t \in T$.

В качестве функции связи может быть использован простой квадратичный штраф. Узловую функцию предлагается вычислять, исходя их того, что параметры калибровки камер известны и зафиксированы. В таком случае, предположив, что поверхность сцены, соответствующая данной области A_t^1 опорного изображения, имеет некоторую постоянную глубину z, можно найти проекцию $A_t'^1 = Pr_z(A)$ области A_t^1 на плоскость второго изображения, используя свойства стереопроекции. Единственным параметром такого преобразования будет являться значение глубины сцены z, что является очень удобным, поскольку позволяет оптимизировать непосредственно искомую величину. В случае ректифицированной стереопары, когда одинаковым эпиполярным линиям соответствуют одинаковые строки изображений, изменение глубины z, приписываемой области A_t^1 на опорном снимке, непосредственно выражается в параллельном сдвиге его проекции $A_t'^1$ по оси X.

В качестве критерия, определяющего соответствие проекции $A_t'^1$ и некоторой области неопорного изображения $A_{t'}^2$, предлагается взять отношение площади симметрической разности $A_t'^1$ и $A_{t'}^2$ к площади их пересечения. Тогда узловая функция примет следующий вид:

$$\psi(z) = \min_{A_{t'}^2 \in \Omega} \left(\frac{S(A_t'^1 \Delta A_{t'}^2)}{S(A_t'^1 \cap A_{t'}^2)} \right),$$

где Ω — множество областей неопорного изображения; $S(A_t^1 \in \Psi)$ — площадь области A_t^1; Ψ — множество всех областей на изображениях.

Поскольку граф (G,T) является деревом, для оптимизации можно использовать эффективный в вычислительном плане метод на основе принципа динамического программирования, который имеет линейную вычислительную сложность относительно числа вершин стекового дерева [5].

Сокращение пространства поиска глубины

Пусть задача восстановления формы трехмерного объекта решается для случая, когда плоские проекции объекта являются снимками, полученными с помощью стереосистемы, модель которой изображена на рис. 3. Для оптимизации сформированного выше критерия оптимального морфологического описания данных применим метод на основе принципа динамического программирования [5]. Данный метод заключается в рекуррентной декомпозиции исходной задачи оптимизации функции многих переменных на последовательность задач оптимизации функции лишь одной переменной. Тем не менее, решение данных промежуточных задач также может требовать значительных вычислительных ресурсов. Для сокращения пространства поиска оптимального значения глубины предполагается воспользоваться следующим методом.

Дискретизируем искомый трехмерный объект по глубине с переменным шагом дискретизации.

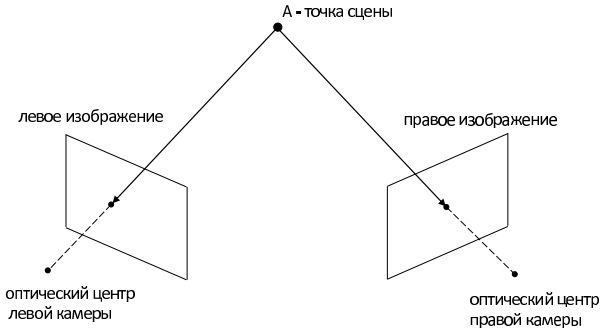


Рис. 3. Модель стереосистемы.

При этом шаг дискретизации подбирается так, чтобы проекция каждой точки трехмерного объекта на плоскость опорного изображения попадала в новый пиксель данного изображения. Для отдельно взятой точки изображения процесс подбора шага дискретизации следующий.

Вначале фиксируются координаты сцены x и y. Затем на плоскость опорного изображения проецируется прямая, параллельная оси OZ и проходящая через точки с данными координатами. Проекция прямой растеризуется, после чего для каждого ее пикселя определяется точка на нерастеризованной проекции, наиболее близкая к центру данного пикселя. Наконец, для каждой найденной точки определяется соответствующая ей точка на прямой, на множестве которых и производится поиск экстремального значения узловой функции.

Обобщим данный подход на области изображения. На каждом этапе перебора для каждой точки области известно значение глубины на следующем шаге. Среди всех этих значений выбирается значение, наиболее близкое к текущему, которое и приписывается области на следующем шаге.

Выводы

Сформулированный подход к задаче восстановления формы трехмерного объекта позволяет использовать метод динамического программирования для оптимизации целевого критерия за счет представления изображения в древовидной форме. Как известно, этого нельзя сделать если рассматривать изображение как решетку. Кроме того, само стековое дерево сохраняет основные особенности изображения, что также выгодно отличает данный подход от методов пирамидальной обработки изображений или подходов, основанных на построении цепочек пикселей по строкам с последующим объединением их в дерево по одному столбцу.

В данной работе рассматривается максимально упрощенная, кусочно-постоянная по областям 3D-модель наблюдаемой сцены. Однако, в будущем предполагается обобщить этот метод и для более сложных видов 3D-моделей.

Литература

[1] *Визильтер Ю. В.* Теория и методы морфологического анализа изображений: дис. д-ра физ.-мат. наук: 05.13.17 — Теоретические основы информатики // Москва: ФГУП «ГосНИИАС», 2008. — 323 с.

[2] *Willsky A. S.* Multiresolution Markov models for signal and image processing // Pattern recognition and Information Processing: Proceedings of the IEEE, 90(8):1396-1458, 2002.

[3] *Yeong-Chyang Shih F., Mitchell O. ;R.* Threshold Decomposition of gray Scale Morphology into Binary Morphology // IEEE trans. on pattern analysis, machine intelligence, vol, II, No 1, January 1989.

[4] *Визильтер Ю. В.* Морфологический анализ одномерных и двумерных функций с использованием стековых представлений // Москва: ФГУП «ГосНИИАС», 2008. — 32 с.

[5] *Kopylov A.* Acyclic pair-wise separable optimization for image processing // Pattern recognition and Information Processing: Proceedings of the Ninth International Conference (22-24 may 2007, Minsk, Republic of Belarus) Minsk: United Institute of Informatics problems of National Academy of Sciences of Belarus. — vol. I. — 2007. — Pp. 203-207.

[6] *Scharstein D., Szeliski R.* A taxonomy and evaluation of dense two-frame stereo correspondence algorithms // Int. Journal of Computer Vision — № 47. — April-June 2002. — Pp. 7–42.

[7] *Визильтер Ю. В.* Обобщенная проективная морфология // Компютерная оптика — 2008. — Т. 32, № 4. — С. 384–399.

Оптимизация псевдоградиента целевой функции при оценивании межкадровых геометрических деформаций изображений*

Ташлинский А. Г.
tag@ulstu.ru
Ульяновск, Ульяновский государственный технический университет

Оценивание межкадровых геометрических деформаций изображений требуется при решении очень широкого круга задач. Различным аспектам этой проблемы посвящено большое число исследований. Одному из подходов и посвящена настоящая работа, в которой рассматриваются вопросы оптимизации псевдоградиента целевой функции качества в псевдоградиентных процедурах оценивания параметров межкадровых геометрических деформаций.

Pseudogradient optimization of the goal function for estimating image interframe geometric deformations*

A. G. Tashlinskii
Ulyanovsk State Technical University, Ulyanovsk, Russia

Estimation of image interframe geometric deformations is required when solving a wide range of problems. A large number of research works are dedicated to different aspects of this problem. This work is devoted to one of approaches, where the problems of optimization of quality goal function pseudogradient in pseudogradient procedures of interframe geometrical deformations parameters estimation are considered.

Введение

В робототехнике, медицине, геологии и других областях все большее распространение получают системы извлечения информации, включающие в себя пространственные апертуры датчиков сигналов. С датчиков поступают динамические массивы пространственно коррелированных данных, представляющих собой последовательность кадров изменяющихся изображений [1]. Межкадровые геометрические деформации этих изображений могут быть описаны математическими моделями деформаций сеток, на которых заданы изображения.

Пусть модель деформаций определена с точностью до вектора параметров $\bar{\alpha}$, исследуемые кадры $Z^{(1)} = \{z_{\bar{j}}^{(1)} \colon \bar{j} \in \Omega\}$ и $Z^{(2)} = \{z_{\bar{j}}^{(2)} \colon \bar{j} \in \Omega\}$ изображений заданы регулярной сеткой отсчетов $\Omega = \{\bar{j} = (j_x, j_y)\}$, а целевая функция качества оценивания сформулирована в терминах нахождения экстремума некоторого функционала $J(\bar{\alpha})$. Параметры $\bar{\alpha}$ можно оценить на основании анализа конкретных реализаций изображений $Z^{(1)}$ и $Z^{(2)}$ [2]:

$$\hat{\bar{\alpha}}_t = \hat{\bar{\alpha}}_{t-1} - \Lambda_t \nabla J(\hat{\bar{\alpha}}, Z^{(1)}, Z^{(2)}), \qquad (1)$$

где $\hat{\bar{\alpha}}_t$ — следующее за $\hat{\bar{\alpha}}_{t-1}$ приближение точки экстремума $J(\hat{\bar{\alpha}}, Z^{(1)}, Z^{(2)})$; Λ_t — матрица, задающая величину изменения оценок на t-й итерации; $\nabla J(\cdot)$ — градиент функционала $J(\cdot)$. Применению процедуры (1) препятствует необходимость многократных громоздких вычислений градиента. Значительно сократить объем вычислений можно, если на каждой итерации вместо $J(\hat{\bar{\alpha}}, Z^{(1)}, Z^{(2)})$ использовать его усечение $\nabla \hat{J}(\hat{\bar{\alpha}}_{t-1}, Z_t)$ на некоторую часть Z_t реализации — локальную выборку:

$$\begin{aligned} Z_t = \{&z_{\bar{j}t}^{(2)}, \tilde{z}_{\bar{j}t}^{(1)}\}; \\ &z_{\bar{j}t}^{(2)} \in Z^{(2)}, \\ &\tilde{z}_{\bar{j}t}^{(1)} = \tilde{z}^{(1)}(\bar{j}_t, \hat{\bar{\alpha}}_{t-1}) \in \tilde{Z}, \end{aligned}$$

где $z_{\bar{j}t}^{(2)}$ — отсчеты деформированного изображения $Z^{(2)}$, взятые в локальную выборку на t-й итерации; $\tilde{z}_{\bar{j}t}^{(1)}$ — отсчет изображения $\tilde{Z}^{(1)}$ (полученного из $Z^{(1)}$ с помощью некоторой интерполяции), координаты которого соответствуют текущей оценке координат отсчета $z_{\bar{j}t}^{(2)} \in Z^{(2)}$; $\bar{j}_t$ — координаты отсчетов $z_{\bar{j}t}^{(2)}$; μ — число отсчетов $\{z_{\bar{j}t}^{(2)}\}$ в Z_t.

При больших размерах изображений требованиям простоты, быстрой сходимости и работоспособности в различных реальных ситуациях, удовлетворяют псевдоградиентные процедуры [3]. Для рассматриваемой задачи псевдоградиентом $\bar{\beta}_t$ будет любой случайный вектор в пространстве параметров, для которого выполняется условие $[\nabla J(\hat{\bar{\alpha}}_{t-1}, Z_t)]^{\mathsf{T}} \mathsf{E}\{\bar{\beta}_t\} \geqslant 0$, где ^{T} — знак транспонирования; $\mathsf{E}\{\cdot\}$ — символ математического ожидания.

Тогда псевдоградиентную процедуру можно записать как [4]:

$$\hat{\bar{\alpha}}_t = \hat{\bar{\alpha}}_{t-1} - \Lambda_t \bar{\beta}_t, \qquad (2)$$

где $t = 0, \ldots, T$ — номер итерации; T — общее число итераций. Для увеличения быстродействия (2) стремятся к уменьшению объема локальной выборки, который непосредственно влияет на скорость

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта фонда «Human Capital Foundation».

сходимости оцениваемых параметров к оптимальным значениям: чем больше μ, тем выше скорость сходимости. Однако с другой стороны, увеличение μ неминуемо ведет и к увеличению вычислительных затрат, что не всегда оправдано и допустимо. При различных рассогласованиях оценок параметров от оптимальных значений и одном том же значении объема выборки отсчеты, взятые в различных областях изображения, дают различную скорость сходимости оценок. Поэтому актуальной является задача оптимизации плана локальной выборки отсчетов, используемых для нахождения псевдоградиента целевой функции, что и определило цель настоящей работы.

Оптимальное евклидово расстояние рассогласования оценок параметров

При любом наборе параметров модели деформаций в результате выполнении очередной итерации для отсчета $z^{(2)}_{\bar{j}k}$ с координатами (j_{xk}, j_{yk}) находится его оценка $\tilde{z}^{(1)}_k$ на опорном кадре с координатами $(\tilde{x}_k, \tilde{y}_k)$. При этом положение точки $(\tilde{x}_k, \tilde{y}_k)$ относительно точки (j_{xk}, j_{yk}) можно описать через евклидово расстояние рассогласования (ЕРР) $R = \sqrt{(j_{xk} - \tilde{x}_k)^2 + (j_{yk} - \tilde{y}_k)^2}$ и угол $\varphi = \arctan(j_{xk} - \tilde{x}_k)/(j_{yk} - \tilde{y}_k)$. Можно показать, что оптимальное значение ЕРР, обеспечивающее максимальную скорость сходимости оценок параметров, зависит только от целевой функции и характеристик исследуемых изображений и не зависит от модели деформаций.

При этом оптимальное значение ЕРР при известном рассогласовании оценок определяет оптимальную область взятия отсчетов локальной выборки. Таким образом, решение задачи нахождения оптимальной области взятия отсчетов локальной выборки можно разбить на два этапа:

— нахождение для выбранной целевой функции качества оценивания оптимального ЕРР как функции плотности распределения вероятностей яркостей, автокорреляционной функции полезного изображения и отношения сигнал/шум;

— определение по модели деформаций и вектору рассогласования оценок параметров оптимальной области взятия отсчетов локальной выборки, как области, в которой обеспечивается оптимальное значение ЕРР.

Рассмотрим решение первой из этих задач. Пусть задана целевая функция. Требуется найти значение ЕРР, при котором извлекается максимум информации о взаимной деформации изображений $Z^{(1)}$ и $Z^{(2)}$. Оценка градиента целевой функции проводится по локальной выборке, содержащей μ пар отсчетов. Каждая пара отсчетов $z^{(2)}_{\bar{j}k}$ и $\tilde{z}^{(1)}_k$, $k = 1, \ldots, \mu$, несет полезную информацию о степени связи этих отсчетов. При этом все пары отсчетов в среднем равноценны, поэтому в дальнейшем будем рассматривать одну пару.

Считая изображение изотропным, для упрощения исследования влияния расстояния между отсчетами $z^{(2)}_{\bar{j}k}$ и $\tilde{z}^{(1)}_k$ на свойства оценки целевой функции целесообразно свести задачу к одномерной. Для этого достаточно задать координатную ось $0{-}J$, проходящей через координаты этих отсчетов с центром в точке (j_x, j_y). Соответственно можно упростить и обозначение отсчетов: $z = z^{(2)}_{\bar{j}k}$, $\tilde{z}^{(1)}_k = \tilde{z}_J$, где J — расстояние между отсчетами.

Информация о степени связи отсчетов z и $\tilde{z}_J$ зашумлена. При аддитивной модели наблюдений изображений: $z = s + \theta$, $\tilde{z}_J = \tilde{s}_J + \tilde{\theta}_J$, шумовая составляющая обусловлена двумя факторами: аддитивными шумами θ, $\tilde{\theta}_J$ и коррелированностью отсчетов. Воздействие некоррелированных аддитивных шумов одинаково при любом положении отсчетов. Случайная же составляющая яркости в отсчетах увеличивается с увеличением расстояния между ними. Будем считать, что

$$\sigma_s^2 = \sigma_{\tilde{s}}^2, \quad \sigma_\theta^2 = \sigma_{\tilde{\theta}}^2, \tag{3}$$

где σ_x^2 — дисперсия x.

Нас интересует информация о степени связи отсчетов z и $\tilde{z}_J$, содержащаяся в псевдоградиенте целевой функции. Рассмотрим воздействие шумовой составляющей на интересующую нас информацию. Градиент целевой функции по заданному направлению может быть найден либо как: $\beta = \partial\hat{J}/\partial J$, либо (если существует первая производная по переменной z) — как $\bar{\beta} = \frac{df}{dz}\frac{dz}{dJ}$. Учитывая, что оба способа подразумевают приближение производных конечными разностями, получаем, соответственно

$$\beta \approx \frac{\hat{J}(J + \Delta_J) - \hat{J}(J - \Delta_J)}{2\Delta_J},$$
$$\beta \approx \frac{df}{dz}\frac{(\tilde{z}_{J+\Delta_J} - \tilde{z}_{J-\Delta_J})}{2\Delta_J}, \tag{4}$$

где Δ_J — приращение координаты J.

Выражения (4) конкретизируем для среднего квадрата межкадровой разности (СКМР), ковариации и коэффициента корреляции отсчетов.

Средний квадрат межкадровой разности яркости отсчетов

В этом случае в соответствии с (4) для псевдоградиента квадрата разности $z - \tilde{z}_J$ получаем, соответственно, выражение:

$$\beta_{\text{СКМР}} \approx \frac{(z - \tilde{z}_J)(\tilde{z}_{J+\Delta_J} - \tilde{z}_{J-\Delta_J})}{\Delta_J}. \tag{5}$$

Анализ (5) показывает, что при $J \to 0$ и $J \to \infty$ математическое ожидание $\mathsf{E}[\beta_{\text{СКМР}}]$ псевдоградиента

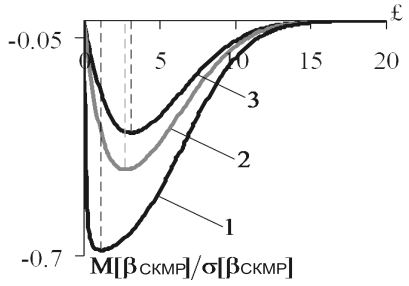


Рис. 1. Отношение математического ожидания β_{CKMP} к его среднеквадратическому отклонению.

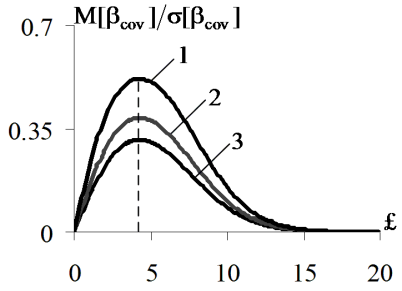


Рис. 2. Отношение математического ожидания β_{COV} к его среднеквадратическому отклонению.

β_{CKMP} стремится к нулю и не несет в себе информации, которую можно было бы использовать для улучшения оценок параметров деформаций.

С учетом допущения (3), получаем:

$$\mathsf{E}[\beta_{\text{CKMP}}] = -\frac{\sigma_s^2}{\Delta_J}\big(R(J+\Delta_J) - R(J-\Delta_J)\big) = \frac{\sigma_s^2}{\Delta_J}C.$$

где $C = R(J+\Delta_J) - R(J-\Delta_J)$; $R(J)$ — нормированная автокорреляционная функция исследуемых изображений.

Шумовая составляющая обусловлена аддитивными шумами θ и коррелированностью отсчетов z и $\tilde{z}$. В предположении (3)

$$\mathsf{D}[\beta_{\text{CKMP}}] = \frac{\sigma_s^4}{(\Delta_J)^2}(4(C_1C_2+g^{-1}(C_1+C_2+g^{-1}))+C^2),$$

где $C_1 = 1 - R(J)$; $C_2 = 1 - R(2\Delta_J)$; $g = \sigma_s^2/\sigma_\theta^2$ — отношение сигнал/шум.

В качестве условия, при котором информация о связи отсчетов s и $\tilde{s}$, извлекаемая из градиента $(z - \tilde{z}_J)^2$, максимальна в среднем, может выступать максимум модуля отношения математического ожидания к среднеквадратическому отклонению:

$$\max|\mathsf{E}[\beta]/\sigma[\beta]| = \tag{6}$$
$$= \max\big|C/\sqrt{4(C_1C_2 + g^{-1}(C_1 + C_2 + g^{-1})) + C^2}\big|.$$

Из (6) можно найти расстояние J_{op} между отсчетами, обеспечивающее извлечение максимума информации при выборе в качестве целевой функции среднего квадрата межкадровой разности. Назовем это расстояние оптимальным EPP J_{op}. Графики отношения $\mathsf{E}[\beta_{\text{CKMP}}]/\sigma[\beta_{\text{CKMP}}]$ как функции J при $g = 500$ (кривая 1), 10 (кривая 2) и 5 (кривая 3) приведены на рис. 1. Расстояние J_{op} может быть найдено традиционным путем через приравнивание к нулю первой производной, откуда получается неявное уравнение для нахождения J_{op}:

С увеличением шумов расстояние, при котором выполняется условие (6), увеличивается. Например, для корреляционной функции радиуса корреляции 5 при $g = 500$ получаем $J_{\text{op}} = 1{,}14$, при $g = 10$ — $J_{\text{op}} = 2{,}75$ и при $g = 5$ — $J_{\text{op}} = 3{,}11$ (рис. 1).

Ковариация отсчетов

Рассмотрим математическое ожидание и дисперсию псевдоградиента произведения $z\tilde{z}_J$. В соответствии с соотношениями (4) можно записать:

$$\beta_{\text{COV}} = \frac{\partial(z\tilde{z}_J)}{\partial J} = \frac{\partial(z\tilde{z})}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial J} \approx$$
$$\approx \frac{z\tilde{z}_{J+\Delta_J} - z\tilde{z}_{J-\Delta_J}}{2\Delta_J} \tag{7}$$

Применяя к (7) рассуждения, аналогичные приведенным выше, получаем, что, математическое ожидание β_{COV}: $\mathsf{E}[\beta_{\text{COV}}] = \frac{\sigma_s^2}{2\Delta_J}C$, а дисперсия:

$$\mathsf{D}[\beta_{\text{COV}}] = \frac{\sigma_s^4}{4(\Delta_J)^2}(2C_2 + C^2 + 2g^{-1}(C_2 + g^{-1})).$$

Графики отношения $\mathsf{E}[\beta_{\text{COV}}]$ к $\mathsf{D}[\beta_{\text{COV}}]$ приведены на рис. 2. Как видно из рисунка максимум отношения не зависит от отношения сигнал/шум (и достигается при том же J_{op}, что и максимум $\mathsf{E}[\beta_{\text{COV}}]$). Условие, при котором информация о связи отсчетов s и $\tilde{s}$, извлекаемая из псевдоградиента произведения $(z\tilde{z})$, максимальна в среднем:

$$\max\big|C/\sqrt{2C_2 + C^2 + 2g^{-1}(C_2 + g^{-1})}\big|. \tag{8}$$

Заметим, что максимум (8) достигается при максимуме числителя, поскольку экстремумы числителя и знаменателя совпадают.

Коэффициент корреляции отсчетов

Несложно показать, что математическое ожидание и дисперсия псевдоградиента выборочного коэффициента межкадровой корреляции (КМК)

$$\frac{\sum\limits_{k=1}^{\mu}(z_{\bar{j}k}^{(2)}\tilde{z}_k^{(1)})}{\mu\sigma_z\sigma_{\tilde{z}}} = \frac{\sum\limits_{k=1}^{\mu}(z_{\bar{j}k}^{(2)}\tilde{z}_k^{(1)})}{\mu(1+g^{-1})\sigma_s^2},$$

где $k = 1, \ldots, \mu$, определяются выражениями:

$$\mathsf{E}[\beta_{\text{KMK}}] = C/(2\Delta_J(1+g^{-1})),$$
$$\mathsf{D}[\beta_{\text{KMK}}] = \frac{2(1+g^{-1})(C_2+g^{-1}) + C^2}{4(\Delta_J)^2\mu(1+g^{-1})^2}.$$

Тогда условие, при котором информация о связи отсчетов s и $\tilde{s}$ максимальна в среднем, принимает вид:

$$\max\left|\mu C/\sqrt{2(1+g^{-1})(C_2+g^{-1})+C^2}\right|. \qquad (9)$$

Заметим, что условие (9) достигается при том же $J_{\text{ор}}$, что и условие (8).

Заключение

Оптимальному ЕРР соответствует максимум отношения математического ожидания градиента оценки целевой функции к его дисперсии. При использовании в качестве целевой функции среднего квадрата межкадровой разности оптимальное ЕРР зависит от отношения сигнал/шум и автокорреляционной функции изображений и увеличивается при увеличении дисперсии шумов. При использовании ковариации и коэффициента корреляции оптимальное значение определяется только автокорреляционной функцией изображения.

Литература

[1] *Gonzalez R. C., Woods R. E.* Digital Image Processing. — New Jersey: Prentice Hall, 2002. — 612 p.

[2] *Taslinskii A. G.* Pseudogradient Estimation of Digital Images Interframe Geometrical Deformations // Vision Systems: Segmentation and Pattern Recognition, Vienna, Austria: I-Tech Education and Publishing, 2007. — P. 465–494.

[3] *Цыпкин Я. З.* Информационная теория идентификации. — М.: Наука. Физматлит, 1995. — 395 с.

[4] *Цыпкин Я. З., Поляк Б. Т.* Критериальные алгоритмы стохастической оптимизации // Автоматика и телемеханика. — 1984. — № 6. — С. 95–104.

Триплетные признаки изображений со сложной полутоновой текстурой*

Федотов Н. Г., Мокшанина Д. А.
fedotov@pnzgu.ru
Пенза, Пензенский государственный университет

Предложен новый метод формирования признаков полутоновых текстур, основанный на аппарате стохастической геометрии и функционального анализа. Ключевым его элементом является применение нового класса конструктивных признаков распознавания — триплетных признаков, получаемых в режиме автоматической компьютерной генерации. Рассмотрена проблема минимизации размерности признакового пространства. Проведена экспериментальная проверка эффективности предложенного метода на примере распознавания полутоновых текстур микрошлифов чугуна с включениями графита.

Triple features of complex gray-scale textured images*

Fedotov N. G., Mokshanina D. A.
Penza State University, Penza, Russia

A new method for gray-scale texture feature generation based on stochastic geometry and functional analysis is suggested. A key element of the method consists in using new constructive recognition features, namely, computer-generated triple features. A problem of feature space dimension minimization is considered. The method effectiveness is verified by experiments on gray-scale iron microsection textures with graphite inclusions.

В статье рассматривается анализ полутоновых текстур на примере изображений из области металлографии.

Химический состав материала не всегда однозначно определяет его свойства. Два образца чугуна с одинаковым химическим составом, но разной формой кристаллизации в них графита, могут иметь совершенно разные свойства. Таким образом, именно форма графитных включений в большей степени определяет свойства чугуна. По виду графитных включений чугуны делятся на:

— чугуны с пластинчатым графитом (серые чугуны) (рис. 1 а);
— чугуны с хлопьевидным графитом (ковкие чугуны) (рис. 1 в);
— чугуны с шаровидным графитом (высокопрочные чугуны) (рис. 1 г);
— чугуны с вермикулярным графитом (высокопрочные чугуны) (рис. 1 б).

Зависимость свойств чугуна именно от формы графитных включений, а не от химического состава сплава, можно продемонстрировать на примере серого чугуна. В сером чугуне графитная фаза вырастает при затвердевании в виде пластин, чаще всего объединенных в розетки, центр которых и есть место, где в жидком чугуне зародился (или развился) центр кристаллизации графитного разветвленного кристалла (центр графитизации). Пластинки графита в сером чугуне сильно разобщают металлическую матрицу, при нагружении и разрушении чугунных деталей они служат внутренними надрезами, концентраторами напряжений и местом образования или прохождения макро- и микротрещин. По этой причине механические свойства серого чугуна значительно ниже, чем у ковкого чугуна с хлопьевидным графитом и в особенности, высокопрочного чугуна с шаровидным графитом. Форма графитных включений у последних видов чугуна при нагружении не приводит

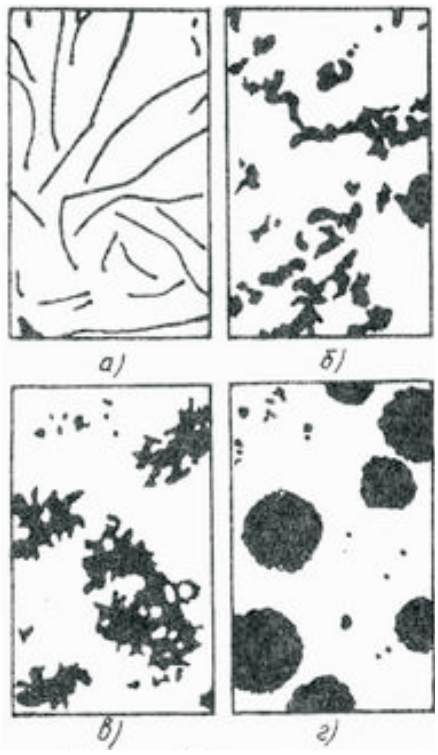


Рис. 1. Примеры чугуна с различными видами включений графита: пластинчатый (а); вермикулярный (б); хлопьевидный (в); шаровидный (г).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-07-00089.

к резкой концентрации напряжений, чем объясняются их высокие прочностные свойства.

Квалифицированный эксперт-аналитик на основе своего опыта может по изображению микрошлифа чугуна сделать экспертное заключение о типе кристаллизации в нем графита. Однако при визуальной обработке большого количества образцов материала неизбежны усталость и рассеивание внимания аналитика, что обусловливает экспертные ошибки. Кроме того, ручная обработка данных требует больших временных затрат, нежели автоматическая. В связи с этим для классификации изображений микрошлифов чугуна с включениями графита целесообразно построить распознающую систему с высокой надежностью принятия решения. Причем в основу такой системы представляется наилучшим положить метод анализа текстур, т.к. изображения микрошлифов чугуна представляют собой полутоновые текстуры.

Важной задачей анализа текстур является выделение признаков. Существующие в настоящее время подходы к данной проблеме предполагают использование небольшого числа признаков, сознательно выделенных экспертом-аналитиком в качестве характеристик. В статье предлагается новый метод анализа текстур, основанный на аппарате стохастической геометрии и функционального анализа, позволяющий выделить большое число информативных признаков изображений.

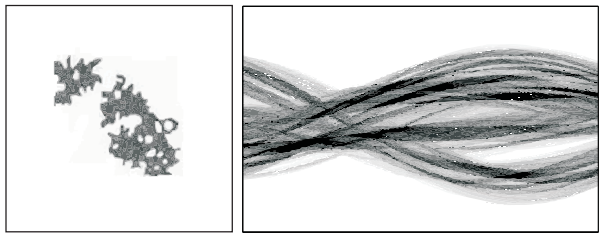
Формирование нового класса признаков текстур

Согласно предлагаемому методу, основанному на аппарате стохастической геометрии и функционального анализа, признаки изображения имеют структуру в виде композиции трех функционалов [2]

$$\Pi(F) = \Theta \circ P \circ T\big(F \cap l(\theta, \rho)\big), \qquad (1)$$

где θ, ρ — нормальные координаты сканирующей прямой $l(\theta,\ \rho)$, с которыми связаны функционалы Θ и P соответственно; функционал T связан с параметром t, задающим точку на сканирующей прямой $l(\theta,\ \rho)$; $F(x,\ y)$ — функция изображения на плоскости $(x,\ y)$. В связи с характерной структурой такие признаки были названы триплетными. Функционал T называют trace-функционалом, P — диаметральным функционалом, Θ — круговым функционалом.

Первым этапом формирования триплетного признака является геометрическое трейс-преобразование, связанное со сканированием изображения по сложным траекториям. Теория трейс-преобразования подробно рассмотрена в [2, 3]. Наибольшее применение в прикладных исследованиях нашел вариант преобразования на основе дискретной



а) *б)*

Рис. 2. Трейс-преобразование: исходное изображение микрошлифа чугуна с хлопьевидным графитом а); трейс-матрица б).

сканирующей решетки. Пример трейс-преобразования демонстрирует рисунок 2.

В дискретном варианте преобразование дает трейс-матрицу, элемент $T(t, \theta_j, \rho_i)$ которой есть значение функционала T, характеризующее взаимное расположение исследуемого изображения $F(x,\ y)$ и сканирующей линии l с i-м значением параметра ρ и j-м значением параметра θ. В качестве указанной характеристики может выступать число пересечений прямой с изображением, свойства окрестности такого пересечения и т. п. [1].

Дальнейшее вычисление признака заключается в последовательной свертке столбцов матрицы с помощью диаметрального функционала P, результатом применения которого к трейс-трансформанте есть 2π-периодическая кривая, а в дискретном варианте — вектор. Далее функционал Θ множеству элементов полученного вектора ставит в соответствие некоторое действительное число, которое равно значению признака.

Функционалы T, P и Θ выбираются из различных областей математики: теории вероятности, математической статистики, теории рядов и фракталов, стохастической геометрии и т. д. Таким образом, триплетные признаки сохраняют следы генезиса соответствующих областей математики, чем объясняется гибкость и интеллектуальность алгоритмов распознавания, базирующихся на триплетных признаках [2]. В частности, при надлежащем выборе функционалов можно получать признаки инвариантные по отношению к движению и линейным деформациям изображений (изменению масштаба), что очень важно при распознавании текстур микрошлифов из области металлографии. Кроме того, могут быть получены признаки, которые простым образом зависят от указанных преобразований. Приведем примеры некоторых инвариантных признаков.

Признак $\Pi_1(F) = \Theta_1 \circ P_1 \circ T_1$, где

$$T_1 = \max_i (t_{i+1} - t_i),$$

$$P_1 = \sqrt{\sum_i T^2(t, \theta_j, \rho_i)}, \qquad \Theta_1 = \sum_j P_j,$$

t_i — границы однородных по яркости отрезков. Этот признак инвариантен к движению, но не инвариантен к линейным деформациям.

Признак $\Pi_2(F) = \Theta_2 \circ P_2 \circ T_2$, где

$$T_2 = \sum_i \big|(t_{i+3} - t_{i+2}) - (t_{i+1} - t_i)\big|,$$

$$P_2 = \frac{\sum\limits_i T(t, \theta_j, \rho_i)}{m \cdot \max\limits_i T(t, \theta_j, \rho_i)}, \qquad \Theta_2 = \sqrt{\sum_j P_j^2},$$

где m — количество строк трейс-матрицы, инвариантен и к движению и к линейным деформациям.

Подробное описание триплетных признаков приведено в [2].

Минимизация размерности признакового пространства

Как отмечалось выше, подход с позиции стохастической геометрии позволяет автоматически генерировать большое число триплетных признаков являющихся абстрактной характеристикой изображения. И, как правило, сформированная таким образом исходная система триплетных признаков избыточна и включает признаки, не влияющие на классификацию или дублирующие друг друга. В некоторых задачах распознавания временные затраты на вычисление признаков могут быть существенными. Опора на минимальный набор эффективных признаков значительно сокращает время работы распознающего алгоритма. Таким образом, после генерации признаков целесообразно провести процедуру минимизации размерности признакового пространства, обеспечивающую выделение минимального набора эффективных поисковых признаков.

Для решения данной задачи могут использоваться различные преобразования и разложения, например, преобразование Фурье, использование коэффициентов Корунена–Лоева, использование методов факторного анализа. В данной работе использовалась минимизация размерности признакового пространства, основная идея которой заключалась в следующем.

Из исходного признакового пространства выбирают такое подпространство, в котором расстояния между разными классами текстур максимально, а расстояние внутри каждого класса минимально. Метод является модификацией метода, рассмотренного в [4].

Эксперимент

Была проведена экспериментальная проверка эффективности описанного подхода применительно к проблеме распознавания полутоновых текстур микрошлифов чугуна с включениями графита. Рассматриваемый в данном примере сплав чугуна имел ферритную металлическую основу с хлопьевидными или шаровидными включениями графита. Выборка состояла из 180 полутоновых текстур микрошлифов чугуна с различными формами графитных включений, 80 из которых представлялись системе на этапе обучения, остальные на этапе тестирования.

Рассматриваемые текстуры микрошлифов чугуна являются полутоновыми. Предлагаемый нами подход ранее применялся лишь к бинарным изображениям, причем формируемые признаки изображений являлись их геометрической характеристикой. В настоящей же задаче мы имеем дело с полутоновыми изображениями, которые, в отличие от бинарных, имеют две группы значимых характеристик: геометрическую и яркостную. Поэтому, для классификации полутоновых текстур, целесообразно построить распознающую систему, учитывающую как геометрические, так и яркостные особенности изображения.

Для решения поставленной задачи были выделены две группы триплетных признаков:

1) признаки, характеризующие геометрические особенности изображения;
2) признаки, характеризующие яркостные особенности изображения.

Признаки первой и второй группы имеют одинаковую трехфункциональную структуру вида (1). Отличие между ними заключается лишь в подходе к заданию характеристик однородных по яркости отрезков сканирующих прямых. Для построения признаков, характеризующих геометрические особенности изображения, однородным по яркости отрезкам сканирующих прямых ставится в соответствие некоторая геометрическая величина (например, длина отрезка). Для построения признаков, характеризующих яркостные особенности изображения, однородным по яркости отрезкам сканирующих прямых ставится в соответствие некоторая яркостная величина (например, средняя яркость отрезка).

Границы однородных по яркости отрезков сканирующей прямой для полутоновых изображений, в отличие от бинарных, определяются неоднозначно. В эксперименте был применен следующий метод обнаружения границ однородных по яркости отрезков сканирующей прямой, пересекающей полутоновую текстуру:

1. определялась яркость в каждой точке сканирующей прямой $l(\theta, \rho)$;
2. по этим данным формировалась функция яркости $I(x)$ для данной прямой;
3. вычислялось значение производной функции яркости $\frac{dI(x)}{dx}$. По её экстремумам определялись резкие перепады яркости, т. е. граничные точки

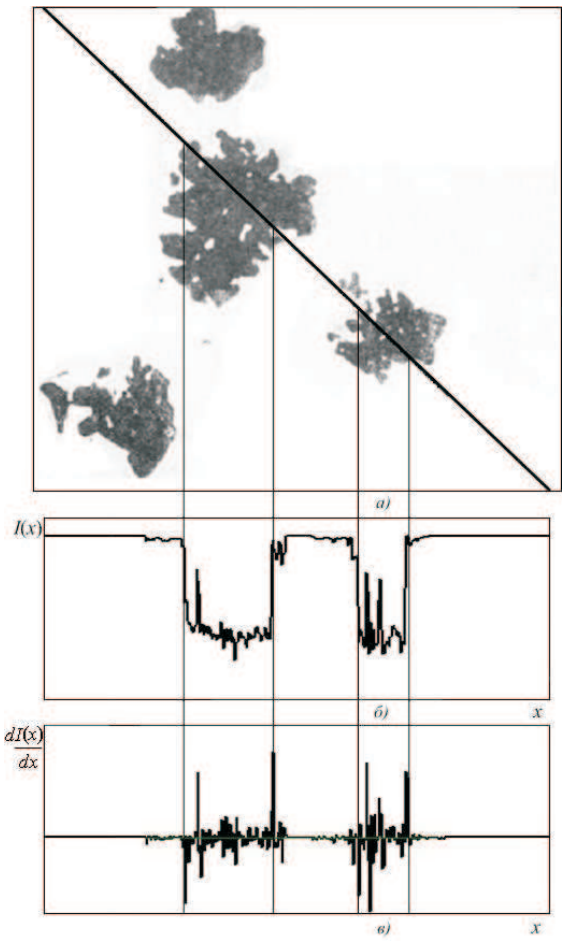


Рис. 3. Текстура микрошлифа чугуна с включениями графита со сканирующей прямой $l(\theta,\ \rho)$ а); функция яркости $I(x)$ б); производная функции яркости $\frac{dI(x)}{dx}$ вдоль сканирующей прямой $l(\theta,\ \rho)$ в).

однородных по яркости отрезков сканирующей прямой $l(\theta,\ \rho)$.

Принцип выделения однородных по яркости отрезков сканирующей прямой демонстрирует рисунок 3.

Как видно из рисунка 3 выбранный метод позволяет с достаточной точностью определять границы однородных по яркости отрезков сканирующей прямой, что делает возможным распространение предлагаемого подхода, основанного на аппарате стохастической геометрии и функционального анализа, на описание полутоновых текстур.

После автоматической генерации было получено 1000 признаков, из которых путем процедуры минимизации было выбрано 150 информативных.

Проведенный эксперимент показал, что средняя ошибка классификации для группы информативных признаков составляет 0,5%. Полученный результат говорит о достаточно высокой эффективности применения описанного подхода к проблеме распознавания полутоновых текстур микрошлифов чугуна с включениями графита.

Выводы

Существует обширный класс задач технической диагностики, где ключевая информация заключена в зрительных образах. В данном случае рассмотрена задача классификации изображений микрошлифов чугуна по формам кристаллизации графитных включений. Для решения данной проблемы предложен новый подход, основанный на аппарате стохастической геометрии, который позволил сформировать новый класс конструктивных признаков распознавания — триплетных признаков. Ключевым элементом их формирования служит новое геометрическое преобразование изображения, связанное со сканированием последнего по сложным траекториям. Характерная особенность признаков является их структура в виде композиции трех функционалов. Благодаря такой структуре возможна генерация большого количества признаков, что позволяет увеличить гибкость, универсальность и надежность распознавания.

В статье показана высокая эффективность этих признаков применительно к распознаванию полутоновых текстур, подтвержденная экспериментально, причем построенная распознающая система учитывает как геометрические так и яркостные особенности полутоновых текстур.

Литература

[1] *Федотов Н. Г.* Методы стохастической геометрии в распознавании образов. — Москва: Радио и связь, 1990. — 144 с.

[2] *Федотов Н. Г.* Теория признаков распознавания образов на основе стохастической геометрии и функционального анализа. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 304 с.

[3] *Fedotov N. G., Shulga L. A.* New Geometric Transform Based on Stochastic Geometry in the Context of Pattern Recognition // Proc.13th Scandinavian Conference on Image Analysis, SCIA 2003, Heidelberg: Springer, 2003. — Pp. 148–155.

[4] *Загоруйко Н. Г.* Прикладные методы анализа данных и знаний. — Новосибирск: Издательство Института математики, 1999. — 270 с.

Оптимизация плана взятия отсчетов при оценивании межкадровых геометрических деформаций изображений*

Хорева А. М., Ташлинский А. Г.
tag@ulstu.ru
Ульяновск, Ульяновский государственный технический университет

При псевдоградиентном оценивании параметров изображений характер сходимости оценок и вычислительные затраты зависят от объема и плана локальной выборки отсчетов изображений, используемой для нахождения псевдоградиента целевой функции. В работе рассмотрен подход к решению задачи оптимизации псевдоградиентных процедур за счет выбора плана отсчетов локальной выборки.

Optimization of the sampling scheme for estimating image interframe geometric deformations*

Khoreva A. M., Tashlinskii A. G.
Ulyanovsk State Technical University, Ulyanovsk, Russia

In the pseudogradient estimation of image parameters, convergence of the estimates and computational costs depend on the size and local sampling scheme of image samples used to determine the pseudogradient of the goal function. An approach is proposed for pseudogradient optimization by the selection of a local sampling scheme.

Постановка задачи

В результате межкадровых геометрических деформаций изображений одни и те же элементы сцены на разных кадрах изображений имеют различные координаты, что можно представить как преобразование системы координат опорного $Z^{(1)}$ изображения в систему координат деформированного $Z^{(2)}$ изображения. Для синтеза процедур оценивания деформаций нужно задаться их моделью. Часто модель может быть задана в параметрической форме. В частности, для плоских изображений при ортонормированной системе координат, когда каждой точке изображения Z ставится в соответствие упорядоченная пара чисел $\bar{\jmath} = (j_x, j_y)^{\intercal}$ декартовых координат, примерами могут служить евклидова, аффинная и проективная модели. Будем считать, что кадры изображений заданы на регулярной прямоугольной сетке $\Omega_{\bar{\jmath}}$ с единичным шагом, деформированное изображение получено из опорного посредством некоторого функционального преобразования, известного с точностью до параметров $\bar{\alpha}$.

Существует большое число методов оценивания межкадровых деформаций, которые были разработаны для различных ограничений на исходные данные. Одним из привлекательных является псевдоградиентное оценивание [1]. Класс псевдоградиентных процедур очень широк и включает в себя процедуры стохастической аппроксимации Робинса-Монро и Кифера-Вольфовица, регулярного и случайного поиска, покоординатного спуска, обобщенного стохастического градиента и многие другие. В общем виде псевдоградиентную процедуру [2] можно представить как

$$\hat{\bar{\alpha}}_t = \hat{\bar{\alpha}}_{t-1} - \Lambda_t \bar{\beta}_t J(Z_t, \hat{\bar{\alpha}}),$$

где $\bar{\alpha}$ — вектор оцениваемых параметров; t — номер итерации; Λ — матрица усиления; $\bar{\beta}$ — псевдоградиент целевой функции $J(\cdot)$, характеризующей качество оценивания; $z^{(2)}_{\bar{\jmath}t}, \tilde{z}^{(1)}_{\bar{\jmath}t}$ — локальная выборка отсчетов, используемая для нахождения псевдоградиента на t-й итерации; $z^{(2)}_{\bar{\jmath}t} \in Z^{(2)}$, $\tilde{z}^{(1)}_{\bar{\jmath}t} = \tilde{z}^{(1)}(\bar{\jmath}_t, \hat{\bar{\alpha}}_{t-1}) \in \tilde{Z}$ — отсчеты непрерывного изображения $\tilde{Z}^{(1)}$, полученного из $Z^{(1)}$; $\bar{\jmath}_t \in \Omega_t \in \Omega_{\bar{\jmath}}$; Ω_t — план локальной выборки.

Для нахождения оптимального плана взятия отсчетов локальной выборки необходимо выбрать критерий оптимальности. Сходимость оценок при псевдоградиентном оценивании параметров изображений зависит от большого числа факторов, как заданных априорно: целевая функция, распределения вероятностей и корреляционные функции изображений и мешающих шумов, так и зависящих от используемой процедуры: способ вычисления псевдоградиента, вид матрицы усиления и число итераций. Для анализа факторы первой группы желательно описать возможно меньшим числом величин. Известно [3] использование в качестве таких величин вероятностей $\rho_i^+(\bar{\varepsilon})$ (изменения оценки $\hat{\alpha}_i$ в пространстве рассогласований $\bar{\varepsilon} = \hat{\bar{\alpha}} - \bar{\alpha}^*$ параметров в сторону оптимального значения α_i^*), (не изменения $\hat{\alpha}_i$) и $\rho_i^-(\bar{\varepsilon})$ (от α_i^*). На их основе для релейных процедур предложен коэффициент улучшения оценки:

$$\mathfrak{R}_i = \rho_i^+(\bar{\varepsilon}) - \rho_i^-(\bar{\varepsilon}),$$

характеризующий вероятностные характеристики изменения оценок в процессе сходимости как

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №10-07-00271.

функционала дисперсии яркости, отношения сигнал/шум и корреляционной функции изображения.

Если оценивается один параметр, то для нахождения оптимальной области взятия отсчетов можно в качестве критерия оптимальности выбрать максимум коэффициента улучшения исследуемого параметра [4]. Однако такой подход к оптимизации плана локальной выборки мало приемлем при оценивании вектора параметров. Это связано с тем, что нахождение коэффициента улучшения вектора оценок в целом встречает труднопреодолимые математические трудности. Рассмотрим иной подход.

Заметим, что для отсчета локальной выборки $z^{(2)} = z$, взятого из деформированного изображения, на опорном изображении по модели деформаций находится его оценка $\tilde{z}^{(1)} = \tilde{z}$ с координатами $(\tilde{x}, \tilde{y})$. При этом положение точки $(\tilde{x}, \tilde{y})$ относительно истинных координат (x, y) можно описать через евклидово расстояние рассогласования (ЕРР) $\mathfrak{L}$ и угол φ:

$$\mathfrak{L} = \sqrt{(x-\tilde{x})^2 + (y-\tilde{y})^2};$$
$$\varphi = \arctan\big((y-\tilde{y})/(x-\tilde{x})\big).$$

Можно показать, что существует оптимальное ЕРР ΔJ_{opt}, обеспечивающее наилучшую сходимость вектора оценок, которое не зависит от модели деформаций и определяется только характеристиками изображений и видом целевой функции. Тогда нахождение оптимальной (субоптимальной) области можно разбить на два этапа:

1) нахождение для заданной целевой функции оптимального евклидова расстояния;
2) определение по модели деформаций и вектору рассогласования оценок области, в которой обеспечивается оптимальное евклидово расстояние.

Решение первой из этих задач рассмотрено в работе [5]. Рассмотрим второй этап, заключающийся в нахождении по модели деформаций и вектору рассогласования оценок параметров области взятия отсчетов, в которой обеспечивается оптимальное (субоптимальное) значение ЕРР. Для определенности будем считать, что используется модель подобия: $\bar{\alpha} = (h_x, h_y, \varphi, k)$, где (h_x, h_y) — параллельный сдвиг, φ — угол поворота; k — масштабный коэффициент.

Построение субоптимальной области при заданном векторе рассогласования

В качестве опорной точки для построения субоптимальной области выберем координаты центра поворота (x_0, y_0). Для произвольной точки $(\tilde{x}, \tilde{y})$ ЕРР определяется всеми оцениваемыми параметрами. При этом модуль ΔJ_h и аргумент φ_h вклада в ЕРР параметров h_x и h_y не зависит от местоположения точки на изображении:

$$\Delta J_h = \sqrt{(\varepsilon_x)^2 + (\varepsilon_y)^2},$$
$$\varphi_h = \arctan \varepsilon_y/\varepsilon_x,$$

где ε_x и ε_y — рассогласование оценок $\hat{h}_x$ и $\hat{h}_y$ от оптимальных значений h_x^* и h_y^*. Вклад параметров φ и k зависит от расстояния L от центра поворота. Так, если рассогласование оценки угла от оптимального значения φ^* равно ε_φ, то оно дает вклад $\Delta J_\varphi = 2L\sin(\varepsilon_\varphi/2)$, где $L = \sqrt{(\tilde{x}-x_0)^2 + (\tilde{y}-y_0)^2}$; ΔJ_φ — модуль вектора вклада. Рассогласование ε_k оценки коэффициента масштаба от оптимального значения k^* дает вклад:

$$\Delta L_k = L(1+\varepsilon_k), \quad \varphi_k = \arctan\big((\tilde{y}-y_0)/(\tilde{x}-x_0)\big).$$

Для совокупности параметров:

$$J^2 = L^2\big(1 + (\varepsilon_k)^2 - 2(1+\varepsilon_k)\cos\varepsilon_\varphi\big) + (\varepsilon_x)^2 + (\varepsilon_y)^2 - 2L\varepsilon_x\big(\cos\gamma - (1+\varepsilon_k)\cos(\gamma+\varepsilon_\varphi)\big) + 2L\varepsilon_y\big(\sin\gamma - (1+\varepsilon_k)\sin(\gamma+\varepsilon_\varphi)\big),$$

где $\gamma = \arcsin\big((\tilde{y}-y_0)/L\big)$ — угол, определяющий направления L относительно базовой оси изображения $(0-x)$.

При известных значениях J_{opt} и вектора $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_\varphi, \varepsilon_k)^{\mathsf{T}}$ полученное выражение позволяет найти значение L_{opt} как функцию угла γ. Несложно показать, что при аффинной модели деформаций геометрическое место точек, для которого ЕРР равно J_{opt}, представляет собой окружность $(x-c)^2 + (y-d)^2 = r^2$ с центром в точке (c, d)

$$c = \frac{\varepsilon_x - (1+\varepsilon_k)(\varepsilon_x\cos\varepsilon_\varphi + \varepsilon_y\sin\varepsilon_\varphi)}{1 + (1+\varepsilon_k)^2 - 2(1+\varepsilon_k)\cos\varepsilon_\varphi};$$

$$d = \frac{\varepsilon_y - (1+\varepsilon_k)(\varepsilon_y\cos\varepsilon_\varphi + \varepsilon_x\sin\varepsilon_\varphi)}{1 + (1+\varepsilon_k)^2 - 2(1+\varepsilon_k)\cos\varepsilon_\varphi},$$

и радиусом

$$r = \frac{(J_{\text{opt}})^2 - (\varepsilon_x)^2 - (\varepsilon_y)^2}{1 + (1+\varepsilon_k)^2 - 2(1+\varepsilon_k)\cos\varepsilon_\varphi} + c^2 + d^2.$$

Формирование вектора рассогласования оценок

Для получения субоптимальной области требуется нахождение двух значений L_1 и L_2, соответствующих диапазону ЕРР от J_1 до J_2, в котором либо ЕРР отличается от оптимального не более, чем на заданную величину, либо границы выбираются из условия: $J_1 = J_{\text{opt}} - \Delta_J$, $J_2 = J_{\text{opt}} + \Delta_J$, где Δ_J — некоторое отклонение. Зависимость рассогласования вектора оценок от числа итераций может быть сформирована различными способами

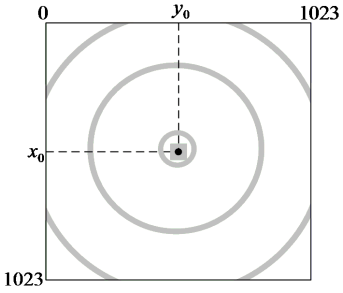


Рис. 1. Субоптимальные области взятия отсчетов локальной выборки.

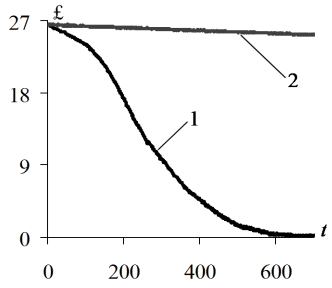


Рис. 2. Зависимость EPP от числа итераций.

и зависит от условий решаемой задачи. В частности алгоритм для обеспечения наилучшей сходимости в среднем приведен в [5]. Практический интерес представляет минимаксный подход, когда находится зависимость субоптимальной подобласти от числа итераций для начального приближения, соответствующего максимально возможному рассогласованию параметров (для наихудшего случая). Определяется число итераций, необходимое для достижения заданной точности оценивания. В дальнейшем полученный закон изменения субоптимальной области применяется для любого начального приближения параметров, обеспечивая точность оценивания не хуже заданной. При этом для принятых автокорреляционной функции и плотности распределения вероятностей яркостей изображений закон изменения субоптимальной области может быть найден аналитически с использованием вероятностного моделирования. Другой путь нахождения границ L_1 и L_2 субоптимальной области состоит в определении на каждой итерации EPP по рассогласованию оценок параметров, полученному экспериментально и усредненному по заданному ансамблю реализаций.

Следует иметь в виду, что для параметров поворота и масштаба в предположении достаточно большого размера изображения теоретически всегда может быть найдена субоптимальная область. Рассогласование по сдвигу инвариантно для любой точки изображения (строго говоря, это утверждение справедливо, если задан только параллельный сдвиг) и может существенно превышать J_1 и J_2, особенно на начальном этапе оценивания. В этом случае по некоторому критерию можно задать базовую область, в которой берутся отсчеты локальной выборки до тех пор, пока уменьшение рассогласования по сдвигу не позволит формировать субоптимальную область, исходя из J_1 до J_2.

Для примера на рис. 1 приведены субоптимальные области взятия отсчетов на 1, 250, 400 и 700 итерациях на изображении размером 1024×1024 с гауссовской корреляционной функцией с радиусом корреляции 13 и отношением сигнал/шум 50. В качестве целевой функции использовался средний квадрат межкадровой разности. Оптимизация проводилась для псевдоградиентной процедуры с параметрами диагональной матрицы усиления $\lambda_x = \lambda_y = 0{,}1$, $\lambda_\varphi = 0{,}15°$ и $\lambda_k = 0{,}01$. Начальное рассогласование вектора параметров составляло $\bar{\varepsilon} = \big(\varepsilon_x = 10,\ \varepsilon_y = 10,\ \varepsilon_\varphi = 25°,\ \varepsilon_k = 0{,}05\big)^{\mathsf{T}}$. Размер базовой области 64×64. Субоптимальная область формировалась по правилу:

$$L_1 = L_{\text{opt}} - 12, \quad L_2 = L_{\text{opt}} + 12.$$

На рис. 2 приведены зависимости евклидова расстояния от числа итераций (при $L = 20$) с использованием субоптимальной области (кривая 1) и без нее (кривая 2). Результаты усреднены по 100 реализациям. Видно, что примерно до 120 итерации (пока отсчеты локальной выборки берутся из базовой области) скорость сходимости евклидова расстояния несколько ниже, поскольку не обеспечиваются условия оптимальности. Уменьшение скорости сходимости наблюдается также при малых расстояниях, что обусловлено выходом субоптимальной области за размеры изображения. Таким образом, оптимизация области взятия отсчетов локальной выборки позволяет значительно снизить вычислительные затраты для достижения той же точности оценивания. В частности, в приведенном примере EPP= 0,5 при оптимизации достигается за 600 итераций, а без оптимизации — за 14 000 итераций, что соответствует выигрышу в быстродействии в 24 раза.

Заключение

При оценивании параметров межкадровых геометрических деформаций план локальной выборки отсчетов, используемых для нахождения псевдоградиента целевой функции, существенно влияет на характер сходимости оценок параметров. Характер сходимости оценок зависит также от распределения яркостей, корреляционных функций изображений и мешающих шумов, а также от выбранного типа целевой функции.

Нахождение оптимальной области может быть основано на оптимизации EPP (расстояния между

истинными координатами точки и текущей оценкой ее местоположения). По модели деформаций и вектору рассогласования оценок параметров можно найти расчетные выражения для оптимальной области. Зависимость вектора рассогласования оценок от числа итераций может быть получена как теоретически по заданным корреляционной функции и распределению яркостей изображения, так и экспериментально по текущим оценкам, усредненным по ансамблю реализаций.

Литература

[1] *Taslinskii A. G.* Pseudogradient Estimation of Digital Images Interframe Geometrical Deformations // Vision Systems: Segmentation and Pattern Recognition, Vienna, Austria: I-Tech Education and Publishing, 2007. — Pp. 465–494.

[2] *Цыпкин Я. З.* Информационная теория идентификации. — М.: Наука. Физматлит, 1995. — 395 с.

[3] *Ташлинский А. Г., Тихонов В. О.* Методика анализа погрешности псевдоградиентного измерения параметров многомерных процессов // Известия вузов: Радиоэлектроника. — 2001. — Т. 44, № 9. — С. 75–80.

[4] *Taslinskii A. G., Khoreva A. M.* Optimization of local sample samples region when pseudogradient estimating image interframe geometrical deformations // 9-th International Conference “Pattern Recognition and Image Analysis: New Information Technologies”: Conference Proceeding, Nizhni Novgorod, 2008. — Vol. 2. — Pp. 249–280.

[5] *Taslinskii A. G.* Optimization of goal function pseudogradient in the problem of interframe geometrical deformations estimation // Pattern Recognition Techniques, Technologe and Applications, Vienna, Austria: I-Tech Education and Publishing, 2008. — Pp. 249–280.

Signal segmentation with label frequency constraints using dual decomposition approach for hidden Markov models*

Kropotov D., Laptev D., Osokin A., Vetrov D.
dmitry.kropotov@gmail.com, laptev.d.a@gmail.com, anton.osokin@gmail.com, vetrovd@yandex.ru
Moscow, Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow State University

We consider a signal segmentation problem within the hidden Markov model (HMM) approach and try to take into account label frequency constraints. Following the dual decomposition approach we maximize an energy lower bound via subgradient ascent method, where subgradient is found on each iteration by solving two subproblems. The first subproblem can be effectively solved by Viterbi algorithm and the other one can be reduced to an easy-to-solve transportation problem. We show the efficiency of our approach on toy signals and on the task of automated segmentation of mouse behavior.

Signal segmentation using hidden Markov models

Hidden Markov model (HMM) is a probabilistic model of a sequence that consists of a set of observed variables $X = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N\}$ (in arbitrary space) and discrete hidden variables $T = \{\boldsymbol{t}_1, \ldots, \boldsymbol{t}_N\}$, where $\boldsymbol{t}_n$ can take K different values. The joint distribution of all variables (see fig. 1) is given by

$$p(X, T) = p(\boldsymbol{t}_1) \prod_{n=1}^{N} p(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{t}_n) \prod_{n=2}^{N} p(\boldsymbol{t}_n \,|\, \boldsymbol{t}_{n-1}). \quad (1)$$

Using 1-of-K coding scheme a discrete variable with K possible values can be represented as $\boldsymbol{t}_n = (t_{n1}, \ldots, t_{nK})$, where

$$t_{nj} = \begin{cases} 1, & \text{if at the moment } n \text{ the model is} \\ & \text{in the } j^{th} \text{ state;} \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Hereinafter we suppose a homogeneous HMM, i. e. the probability $p(\boldsymbol{t}_n \,|\, \boldsymbol{t}_{n-1})$ and emission probability $p(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{t}_n)$ do not depend on n. Hence, $p(\boldsymbol{t}_n \,|\, \boldsymbol{t}_{n-1})$ can be fully characterized by a transition matrix A of size $K \times K$, where $A_{ij} = p(t_{nj} = 1 \,|\, t_{n-1,i} = 1)$, $\sum_{j=1}^{K} A_{ij} = 1$. Equivalently,

$$p(\boldsymbol{t}_n \,|\, \boldsymbol{t}_{n-1}) = \prod_{i=1}^{K} \prod_{j=1}^{K} A_{ij}^{t_{n-1,i}\, t_{nj}}.$$

The prior probability $p(\boldsymbol{t}_1)$ at the first moment is given by $\boldsymbol{\pi}\colon p(t_{1j} = 1) = \pi_j$, $\sum_{j=1}^{K} \pi_j = 1$ and $p(\boldsymbol{t}_1) = \prod_{j=1}^{K} \pi_j^{t_{1j}}$.

We assume that emission probability $p(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{t}_n)$ for state j is given by parametric distribution $p(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{\varphi}_j)$, where $\boldsymbol{\varphi}_j$ is a set of parameters. Hence,

$$p(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{t}_n) = \prod_{j=1}^{K} \big(p(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{\varphi}_j)\big)^{t_{nj}}.$$

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (projects 08-01-00405, 10-01-90419), the Russian President Grant MK-3827.2010.9 and Federal Target Program "Scientific and scientific-pedagogical personnel of innovative Russia in 2009–2013" (contract no. P1265).

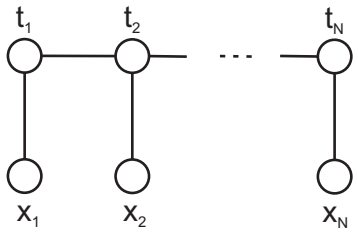


Fig. 1. Chain dependency of variables in HMM joint distribution (1). Variables in one factor are connected by edges.

Denote all HMM parameters as $\Theta = \{\boldsymbol{\pi}, A, \boldsymbol{\varphi}\}$. The maximum a posteriori (MAP) approach [5] is a standard way to find the hidden variables T:

$$T^* = \arg\max_T p(T \,|\, X, \Theta) = \arg\max_T p(X, T \,|\, \Theta) = \arg\max_T \log p(X, T \,|\, \Theta). \quad (2)$$

Taking negative log and changing maximum to minimum the problem (2) can be equivalently rewritten as a min-energy problem with binary variables:

$$E_{\text{local}}(T) = -\log p(X, T \,|\, \Theta) = -\left(\sum_{j=1}^{K} t_{1j} \log \pi_j\right) - \left(\sum_{n=2}^{N} \sum_{i=1}^{K} \sum_{j=1}^{K} t_{n-1,i} t_{nj} \log A_{ij}\right) - \left(\sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} t_{nk} \log p(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{\varphi}_k)\right) \to \min_T. \quad (3)$$

This energy function is pairwise separable [1] and thus can be effectively minimized by Viterbi algorithm [6] in linear time w. r. t. signal length N.

Label frequency constraints

In this paper we consider the problem of signal segmentation with label frequency constraints. Denote $m_k = \sum_{n=1}^{N} t_{nk}$ — the total occurrence of label k in segmented signal. Suppose we have a function $f_k(m_k)$ that penalizes the deviation of frequency m_k from the desired one. Then signal segmentation problem with label frequency constraints can

be written as

$$E(T) = E_{\text{local}}(T) + E_{\text{global}}(T) = E_{\text{local}}(T) + \sum_{k=1}^{K} f_k(m_k) \to \min_T. \quad (4)$$

This corresponds to adding a global prior over T of the form $p(T) = \exp\bigl(-\sum_{k=1}^{K} f_k(m_k)\bigr)$ into the joint distribution (1).

In general case the problem (4) is NP-hard. From perspectives of graphical models of kind from Fig. 1 the problem (4) corresponds to the graph where all variables $\boldsymbol{t}_n$ are connected with each other (the full graph). Thus, the graph contains a lot of cycles, and therefore effective precise algorithms like Viterbi can not be applied. In this paper we consider three types of penalty functions $f_k(m_k)$ and for them derive approximate schemes for solving the problem (4):

Hard constraints:
$$f_k(m_k) = \begin{cases} 0, & \text{if } m_k = b_k; \\ +\infty, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (5)$$

Interval constraints:
$$f_k(m_k) = \begin{cases} 0, & \text{if } m_k \in [b'_k, b''_k]; \\ +\infty, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (6)$$

Soft constraints:
$$f_k(m_k) = \alpha_k |m_k - b_k|, \ \alpha_k > 0. \quad (7)$$

Dual Decomposition Approach

The energy (4) cannot be minimized effectively, but both summands $E_{\text{local}}(T)$ and $E_{\text{global}}(T)$ can be minimized separately in efficient manner. This leads to the idea of using the dual decomposition approach [2].

Following this approach we rewrite the problem (4) in the following way:

$$\min_{\substack{T_1,T_2:\\ T_1=T_2}} E_{\text{local}}(T_1) + E_{\text{global}}(T_2) = \min_{\substack{T_1,T_2:\\ T_1=T_2}} E_{\text{local}}(T_1) + E_{\text{global}}(T_2) + \boldsymbol{\lambda}^{\intercal}(T_1 - T_2).$$

Here T_1, T_2 are supposed to be vectors of length NK of the form $T = [t_{11}, \ldots, t_{1K}, t_{21}, \ldots, t_{NK}]$. Denoting

$$F_1(\boldsymbol{\lambda}) = \min_{T_1}\bigl(E_{\text{local}}(T_1) + \boldsymbol{\lambda}^{\intercal} T_1\bigr), \quad (8)$$

$$F_2(\boldsymbol{\lambda}) = \min_{T_2}\bigl(E_{\text{global}}(T_2) - \boldsymbol{\lambda}^{\intercal} T_2\bigr), \quad (9)$$

we get the dual problem:

$$\max_{\boldsymbol{\lambda}}\bigl(F_1(\boldsymbol{\lambda}) + F_2(\boldsymbol{\lambda})\bigr). \quad (10)$$

From (8), (9) it can be seen that $F_1(\boldsymbol{\lambda}) + F_2(\boldsymbol{\lambda})$ is the lower bound for $E_{\text{local}}(T_1) + E_{\text{global}}(T_2) + \boldsymbol{\lambda}^{\intercal}(T_1 - T_2)$, and taking $T_1 = T_2 = T$ we get that $F_1(\boldsymbol{\lambda}) + F_2(\boldsymbol{\lambda})$ is the lower bound for $E_{\text{local}}(T) + E_{\text{global}}(T)$. Solving the problem (10) we would approximately fit the min-energy in the original problem (4).

The similar approach was used in [3] for image segmentation problem, but there it was assumed that E_{local} can be minimized only approximately by algorithms providing a lower bound for local energy, e. g. by tree-reweighted message passing [7]. In this paper we consider the case when local energy can be minimized in an exact way by Viterbi algorithm.

It's easy to see that $F(\boldsymbol{\lambda}) = F_1(\boldsymbol{\lambda}) + F_2(\boldsymbol{\lambda})$ is a concave piecewise-linear function and thus it can be effectively maximized by subgradient ascent method. A particular subgradient of $F_1(\boldsymbol{\lambda}) + F_2(\boldsymbol{\lambda})$ can be found analytically and is equal to $T_1(\boldsymbol{\lambda}) - T_2(\boldsymbol{\lambda})$, where $T_1(\boldsymbol{\lambda})$ and $T_2(\boldsymbol{\lambda})$ are argmins of the problems (8) and (9) respectively. Hence, iteration i of the subgradient ascent method is the following:

$$\boldsymbol{\lambda}_{i+1} = \boldsymbol{\lambda}_i + \delta_i(T_1 - T_2), \quad (11)$$

where δ_i is a step value.

Note that if $T_1(\boldsymbol{\lambda}) = T_2(\boldsymbol{\lambda})$ for some $\boldsymbol{\lambda}$, than we obtain the global optimum of (4). However, in general case, since energy function (4) is not convex, the maximum of (10) doesn't have to coincide with the minimum of (4). Besides, $T_1(\boldsymbol{\lambda})$ and $T_2(\boldsymbol{\lambda})$ do not coincide during subgradient ascent iterations and hence we need a special procedure for solution harmonization. Here we simply keep track of energy value (4) for both $T_1(\boldsymbol{\lambda})$ and $T_2(\boldsymbol{\lambda})$ for all iterations and return the one with the minimum value of (4).

Next we show how to solve the problems (8) and (9) on each step of the subgradient ascent method.

Viterbi algorithm

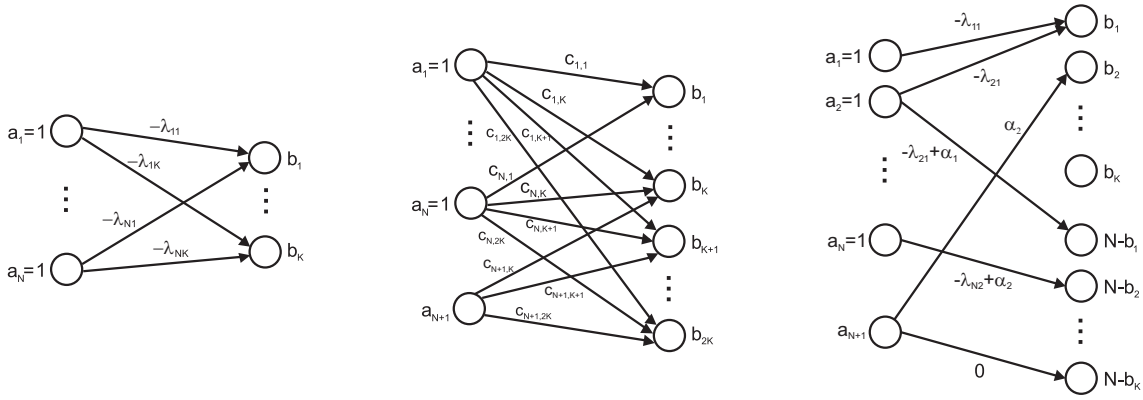
The criterion function in the optimization problem (8) can be written as

$$E_{\text{local}}(T_1) + \boldsymbol{\lambda}^T T_1 = -\left(\sum_{j=1}^{K} t_{1j} \log \pi_j\right) - \left(\sum_{n=2}^{N}\sum_{i=1}^{K}\sum_{j=1}^{K} t_{n-1,i}\, t_{nj} \log A_{ij}\right) - \left(\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} t_{nk}\bigl(\log p(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{\varphi}_k) - \lambda_{nk}\bigr)\right).$$

Note that this function coincides with the pairwise-separable local energy (3) with a simple modification of unary terms. Hence, this energy can be minimized efficiently by Viterbi algorithm.

Reduction to transportation problem

The problem (9) for penalty functions (5), (6) and (7) can be reduced to a transportation problem which is a particular case of linear programming problem that can be solved efficiently.



(a) (b) (c)

Fig. 2. Transportation problems for the hard constraints (a), the interval constraints (b) and the soft constraints (c).

First consider the case of hard constraints (5). Then the problem (9) transforms to the following one:

$$\begin{cases} -\sum\limits_{n=1}^{N}\sum\limits_{k=1}^{K}\lambda_{nk}t_{nk} \to \min\limits_{T}; \\ \sum\limits_{k=1}^{K} t_{nk} = 1; \quad \sum\limits_{n=1}^{N} t_{nk} = b_k; \\ t_{nk} \in \{0,1\}. \end{cases} \tag{12}$$

Note that the problem (12) is the binary transportation problem with N sources and K targets. Source nodes have capacity 1 and correspond to time moments. Target nodes correspond to labels and their capacities equal the corresponding values b_k (see fig. 2a). Now consider LP-relaxation of (12) by allowing t_{nk} to be continuous: $t_{nk} \in [0,1]$. It is a well-known fact [4] that in case of integer b_k the optimal values of t_{nk} are also integer. Hence the optimal solutions of (12) and its LP-relaxation are the same and we may use efficient continuous methods, e. g. simplex-method, in order to find the best labeling.

Now consider the case of interval constraints (6). The corresponding problem (9) can be solved by a straightforward generalization of the transportation problem (12). We add an extra source node (see fig. 2b) to the graph with capacity

$$a_{N+1} = \sum_k b''_k - N$$

and K extra target nodes with capacities

$$b_{K+k} = b''_k - b'_k, \quad k = 1,\dots,K.$$

Also we define the capacity of the remaining target nodes as

$$b_k = b'_k, \quad k = 1,\dots,K.$$

The cost terms are defined in the following way

$$\begin{aligned} &c_{nk} = c_{n,K+k} = -\lambda_{nk}, \quad n = 1,\dots,N,\ k = 1,\dots,K, \\ &c_{N+1,k} = +\infty, \quad k = 1,\dots,K, \\ &c_{N+1,K+k} = 0, \quad k = 1,\dots,K. \end{aligned}$$

The final transportation problem has the form

$$\begin{cases} \sum\limits_{n=1}^{N+1}\sum\limits_{k=1}^{2K} c_{nk}t_{nk} \to \min\limits_{T}; \\ \sum\limits_{k=1}^{K} t_{nk} = 1, \quad n = 1,\dots,N; \\ \sum\limits_{k=1}^{K} t_{N+1,k} = \sum\limits_{k}^{K} b''_k - N; \\ \sum\limits_{n=1}^{N+1} t_{nk} = b_k, \quad k = 1,\dots,2K; \\ t_{nk} \geqslant 0. \end{cases} \tag{13}$$

Hence we want to distribute $\sum_{k=1}^{K} b'_k$ units from the first N sources among the first K targets. The remaining units from all sources are distributed among the last K targets. The extra source node is required to deal with surplus of $\sum_{k=1}^{K} b''_k - N$ units.

Consider the soft constraints (7). This case corresponds to the following optimization problem:

$$\begin{cases} -\sum\limits_{n=1}^{N}\sum\limits_{k=1}^{K}\lambda_{nk}t_{nk} + \sum\limits_{k=1}^{K}\alpha_k\left|\sum\limits_{n=1}^{N} t_{nk} - b_k\right| \to \min\limits_{T}; \\ \sum\limits_{k=1}^{K} t_{nk} = 1; \quad t_{nk} \in \{0,1\}. \end{cases}$$

This problem can be reduced to the transportation problem with $2K$ target nodes and $N+1$ source nodes. The first K target nodes have capacities b_k while the remaining ones have capacities $N-b_k$. The transportation costs are defined in the following way (see fig. 2c):

$$\begin{aligned} &c_{nk} = -\lambda_{nk}, \quad n = 1,\dots,N,\ k = 1,\dots,K, \\ &c_{N+1,k} = \alpha_k, \quad k = 1,\dots,K, \\ &c_{n,K+k} = -\lambda_{nk} + \alpha_k, \quad n = 1,\dots,N,\ k = 1,\dots,K, \\ &c_{N+1,K+k} = 0, \quad k = 1,\dots,K. \end{aligned}$$

The capacity of the source node $N+1$ (virtual units) is defined so that the transportation problem is balanced, i. e. $a_{N+1} = (K-1)N$. Note that with such transportation costs the situation when some real units are transported to the target $K+k$ while some

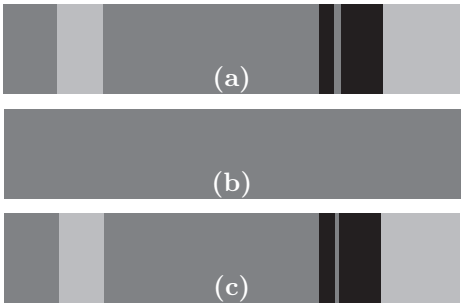


Fig. 3. Segmentation results for a toy signal. a: true segmentation, b: Viterbi segmentation, c: DD HMM segmentation.

virtual units are transported to the target k is impossible since it is always better to assign those real units to the target k and virtual ones to the target $K + k$.

Experimental results

First consider a toy signal generated from HMM with 3 hardly distinguishable states and the following parameters:

$$\boldsymbol{\pi} = [0.2, 0.2, 0.6]^\intercal, \quad A = \begin{bmatrix} 0.98 & 0.01 & 0.01 \\ 0.01 & 0.98 & 0.01 \\ 0.01 & 0.01 & 0.98 \end{bmatrix}.$$

The observed values $\boldsymbol{x}_n \in \mathbb{R}^2$, $n = 1, \ldots, 500$ were generated from Gaussian emission probabilities $\mathcal{N}(\boldsymbol{x} \,|\, \boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k)$ with parameters:

$$\boldsymbol{\mu}_1 = [-1, 0]^\intercal, \quad \boldsymbol{\mu}_2 = [0, 1]^\intercal, \quad \boldsymbol{\mu}_3 = [0, 0]^\intercal,$$

$$\Sigma_1 = \begin{bmatrix} 0.3 & 0.1 \\ 0.1 & 0.3 \end{bmatrix}, \quad \Sigma_2 = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{bmatrix}, \quad \Sigma_3 = \begin{bmatrix} 1.2 & 0.4 \\ 0.4 & 1.2 \end{bmatrix}.$$

We compared the true segmentation (see Fig. 3a) with the segmentation of Viterbi algorithm without constraints (see Fig. 3b) and DD HMM with hard constraints obtained from the true segmentation (see Fig. 3c). As can be seen, Viterbi failed to distinguish different states while DD HMM gave the result similar to the true one due to considering of label frequency constraints. The behavior of energy function (4) and its lower bound (10) during DD HMM iterations are shown in Fig. 4.

The next experiment is mouse video tracking segmentation into four behavior acts: sitting in one place,

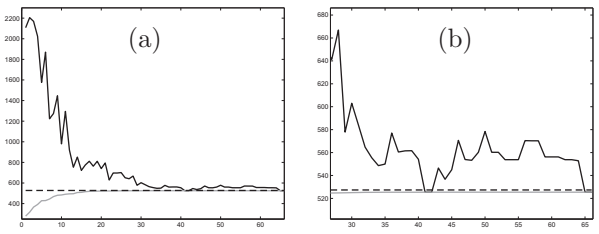


Fig. 4. Behavior of energy function (black) and its lower bound (grey) during DD HMM iterations for a toy signal segmentation problem. The energy value for the true segmentation is shown by dotted line. Case b is an enlarged part of a.

Table 1. Confusion matrix for DD HMM with hard constraints.

	sitting	grooming	walking	running
sitting	4223	126	93	48
grooming	126	237	0	0
walking	83	0	807	67
running	58	0	57	75

Table 2. Confusion matrix for standard HMM.

	sitting	grooming	walking	running
sitting	4226	0	47	217
grooming	363	0	0	0
walking	24	0	685	248
running	16	0	10	164

grooming, walking and running. The video tracking system measures a set of characteristics for each time moment: mouse contour and three points – gravity centre, nose point and tail point. Using these characteristics we calculate for each time moment a set of features like speed, acceleration, different angles, etc. Then using these features and a set of manually segmented mouse trajectories we learn emission probabilities $p(\boldsymbol{x}_n \,|\, \boldsymbol{t}_n)$ for each state (behavior act) by means of mixture of Gaussians as well as transition matrix A and prior probabilities $\boldsymbol{\pi}$. Finally we make segmentation using HMM without constraints (Viterbi algorithm) and DD HMM with hard constraints obtained from the true segmentation. Tables 1 and 2 show confusion matrices for both cases. As can be seen DD HMM shows much better performance resulting in accuracy 89.03% comparing to accuracy 84.58% for standard HMM.

References

[1] *Perner P.* Machine learning and data mining in pattern recognition. — New York: Springer. — 2009.

[2] *Komodakis N., Paragios N., Tziritas G.* MRF optimization via dual decomposition: message-passing revisited // ICCV. — 2007.

[3] *Woodford O., Rother C., Kolmogorov V.* A global perspective on MAP inference for low-level vision // ICCV. — 2009.

[4] *Sigal I., Ivanova A.* An introduction to discrete programming: models and computational algorithms, 2nd ed. — Moscow: Fizmatlit. — 2007. (in Russian).

[5] *Bishop C.* Pattern recognition and machine learning. — New York: Springer. — 2006.

[6] *Viterbi A.* Error bounds for convolutional codes and an asymptotically optimum decoding algorithm // IEEE Transactions on Information Theory. — 1967. — Vol. 13. — Pp. 260–267.

[7] *Kolmogorov V.* Convergent tree-reweighted message passing for energy minimization // IEEE TPAMI. — 2006. — Pp. 1568–1583.

Сравнение формы нескольких сигналов, порожденных нелинейным монотонным преобразованием из неизвестного прообраза, и оценивание параметров их формы*

Демин Д. С., Чуличков А. И.
dmitryy.demin@gmail.com
Москва, МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет

Предлагается метод сравнения по форме нескольких сигналов, порожденных общим сигналом-прообразом путем монотонного преобразования его значений при наличии ограниченного шума, моделирующего погрешности, сопровождающие процесс регистрации. Приводится способ применения метода для оценки параметров формы этих сигналов.

Comparison of shape of several signals generated by a monotonous transformation of an unknown prototype signal, and their shape parameters estimation*

Demin D. S., Chulichkov A. I.
Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, Russia

A method is proposed for comparison of shape of several signals generated of an unknown prototype signal by a monotonous transformation of its values. The process of signal registration is accompanied by bounded noise simulating the measurement errors. The method is applied for signal shape parameters estimation.

Введение

Сравнение формы нескольких сигналов, порожденных нелинейным монотонным преобразованием из неизвестного прообраза оказывается необходимым при решении ряда задач анализа и интерпретации сигналов, в частности, для анализа сигналов, получаемых при инфразвуковом мониторинге земной атмосферы. При проведении инфразвукового мониторинга атмосферы регистрируются сигналы от удаленного источника с помощью группы пространственно разнесенных микрофонов. Базовой задачей мониторинга является определение азимутального направления прихода акустической волны, а также скорости ее следа [2]. Эти параметры могут быть легко выражены через величины относительных временных задержек сигналов в различных каналах.

Так как источник звука для всех микрофонов один и тот же, форма регистрируемых сигналов оказывается визуально похожей, однако вследствие нелинейности распространения инфразвука в земной атмосфере, а также погрешностей при регистрации сигналов (различного рода шумы, неодинаковость характеристик микрофонов), предположение о линейной связи сигналов в различных каналах с их прообразом часто не выполняется. В то же время, большая часть методов, широко используемых сейчас в инфразвуковом мониторинге для оценки относительной задержки сигналов (корреляционных [6], основанных на преобразовании Фурье [3], РМСС [4]), опирается на предположение о наличии такой линейной связи. Другая часть методов опирается на наличие большого числа микрофонов, когда становится статистически оправдано применение применение методов, подобных основанному на F-статистике [5]. Критерием адекватности оценивания относительной задержки сигналов в нескольких каналах как правило служит априорная информация о равенстве нулю суммы относительных задержек для всех троек каналов, соответствующих несовпадающим микрофонам.

Морфологический метод, предложенный в работе [7], предполагает монотонную связь сигналов в отдельных каналах при отсутствии шумовой составляющей. Однако он справедлив для оценивания относительных временных задержек только для двух каналов, и, кроме того, обладает известной асимметрией, связанной с тем, что осуществляется поиск фрагмента одного сигнала, максимально близкого к классу сигналов, порожденных монотонным преобразованием из фрагмента второго сигнала. В данной работе производится попытка избавиться от этого недостатка ранее предложенного морфологического метода.

Сравнение по форме фрагментов нескольких сигналов

Модель формирования сигнала. Пусть в результате наблюдения некоторого объекта может быть получена информация, имеющая вид матрицы $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{n\times m}$, состоящей из действительных чисел $\xi_{i,j}$, где $i = 1,\ldots,n$ — номер строки (отсчета по времени), а $j = 1,\ldots,m$ — номер столбца (номер микрофона или канала). Будем считать модель

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 08-07-00120-а.

формирования этих данных следующей:

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{h} + \boldsymbol{\nu}, \quad \boldsymbol{h}, \boldsymbol{\nu} \in \mathbb{R}^{n\times m}; \tag{1}$$

$$\boldsymbol{h} \in \mathbb{V}_{mf}; \tag{2}$$

$$\mathbb{V}_{mf} = \big\{\boldsymbol{g} \in \mathbb{R}^{n\times m} \colon \boldsymbol{g}_{\cdot,j} \in \mathbb{R}^n, \\ \boldsymbol{g}_{\cdot,j} = F_j \circ \boldsymbol{f},\ \boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^n\big\} \subset \mathbb{R}^{n\times m}, \tag{3}$$

где $\boldsymbol{\nu}$ — шум, свойства которого мы зададим далее, $\mathbb{V}_{mf}$ — множество, называемое формой сигнала [1], $F_j(\cdot)$ — j-е монотонное преобразование:

$$F_j(\cdot) \colon \mathbb{R}^1 \to \mathbb{R}^1 \colon \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}^1, \\ x_1 \geqslant x_2 \Rightarrow F_j(x_1) \geqslant F_j(x_2). \tag{4}$$

Данная модель описывает формирование сигналов в нескольких каналах, порожденных из общего прообраза $\boldsymbol{f}$ монотонными преобразованиями $F_j(\cdot)$.

Подход, основанный на приближении полностью упорядоченным множеством точек. Общая идея подхода. Рассмотрим линейное пространство действительных чисел $\mathbb{X}$ с нормой $\mathsf{norm}(\cdot)$. На m-мерном прямом произведении $\mathbb{X}^m$ пространств $\mathbb{X}$ введем норму $\mathsf{Norm}^{(m)}$ как комбинацию с использованием правила $\oplus$:

$$\mathsf{Norm}^{(m)}(\cdot) \colon \mathsf{Norm}^{(m)}(\boldsymbol{z}) = \bigoplus_{j=1}^{m} \mathsf{norm}_j(z_j), \\ \boldsymbol{z} \in \mathbb{X}^m,\ z_j \in \mathbb{X}. \tag{5}$$

Рассмотрим данные от наблюдаемого объекта $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{X}^{n\times m}$ (1) как множество точек

$$\{\boldsymbol{\xi}_{i,\cdot}\}_{i=1}^n \subset \mathbb{X}^m,\ \boldsymbol{\xi}_{i,\cdot} \in \mathbb{X}^m,\ (\boldsymbol{\xi}_{i,\cdot})_j = \xi_{i,j} \in \mathbb{X}.$$

Поставим задачу о приближении результата измерения $\boldsymbol{\xi}$ полностью упорядоченным множеством точек $\{\boldsymbol{\eta}_{i,\cdot}\}_{i=1}^n \subset \mathbb{X}^m$, таким что $\boldsymbol{\eta}_{i+1,\cdot} \geqslant \boldsymbol{\eta}_{i,\cdot}$, $i = 1, \ldots, n$. Отношение $\geqslant$, в свою очередь, определим естественным образом:

$$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{X}^m, \tag{6}$$

$$\boldsymbol{a} \geqslant \boldsymbol{b} \iff a_j \geqslant b_j,\ j = 1, \ldots, m. \tag{7}$$

В случае, когда предположение (3) о том, что сигналы порождены монотонным (здесь и далее будем считать, что монотонно неубывающим) преобразованием верно, а шум не очень велик, это множество точек должно оказаться полностью упорядоченным с отношением порядка $\geqslant$. В случае, если этого не произошло, отклонение от наилучшего их приближения точками полностью упорядоченного множества в сравнении с шумом даст меру адекватности модельного предположения (3).

Далее будем использовать вектор $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{X}^{n\times m}$, такой что множество точек $\{\boldsymbol{\eta}_{i,\cdot}\}_{i=1}^n \subset \mathbb{X}^m$ есть полностью упорядоченное множество с отношением порядка $\geqslant$, введенным выше. Обозначим $\mathbb{H}^{n\times m}$ множество таких векторов. Также потребуется класс $\mathbb{K}$ биекций множества $1, \ldots, n$ на себя:

$$\mathbb{K} = \big\{k(\cdot) \colon \{1, \ldots, n\} \leftrightarrow \{1, \ldots, n\},\ \exists k^{-1}(\cdot)\big\}.$$

Задачу наилучшего приближения результата измерения $\boldsymbol{\xi}$ элементами $\mathbb{H}$ поставим как экстремальную задачу:

$$\boldsymbol{\eta} = \operatorname*{arg\,inf}_{\substack{\boldsymbol{\eta}\in\mathbb{H}^{n\times m} \\ k(\cdot)\in\mathbb{K}}} \bigoplus_{i=1}^{n} \mathsf{Norm}_i^{(m)}\big((\boldsymbol{\xi}_{i,\cdot}) - (\boldsymbol{\eta}_{k(i),\cdot})\big) = \\ = \operatorname*{arg\,inf}_{\substack{\boldsymbol{\eta}\in\mathbb{H}^{n\times m} \\ k(\cdot)\in\mathbb{K}}} \bigoplus_{i=1}^{n} \bigoplus_{j=1}^{m} \mathsf{norm}_{i,j}(\xi_{i,j} - \eta_{k(i),j}). \tag{8}$$

В общем случае эта задача сводится к перебору всех возможных линейных расширений частично упорядоченного (6)–(7) множества точек $\{\boldsymbol{\xi}_{i,\cdot}\}_{i=1}^n$ и применении метода ветвей и границ для отсечения достоверно неудачных биекций $k(\cdot)$. Отклонение от нуля минимального значения функционала в (8) в сравнении с шумом соответствует степени адекватности модельного предположения.

Случай евклидовой метрики В этом случае $\mathsf{norm}(q) = q^2$, $\bigoplus = \sum$, $\oplus = \sum$; экстремальная задача ставится следующим образом:

$$\inf_{\substack{\boldsymbol{\eta}\in\mathbb{H}^{n\times m} \\ k(\cdot)\in\mathbb{K}}} \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} (\xi_{i,j} - \eta_{k(i),j})^2. \tag{9}$$

Предложить вычислительную реализацию, более эффективную, чем для общего случая, для данной меры сходства нам пока не удалось. Для ее использования может быть предложен приближенный метод вычисления, основанный на динамическом программировании.

Случай равномерной метрики В этом случае $\mathsf{norm}(q) = |q|$, $\bigoplus = \max$, $\oplus = \max$; экстремальная задача ставится следующим образом

$$\inf_{\substack{\boldsymbol{\eta}\in\mathbb{H}^{n\times m} \\ k(\cdot)\in\mathbb{K}}} \max_{i=1,\ldots,n} \max_{j=1,\ldots,m} |\xi_{i,j} - \eta_{k(i),j}|. \tag{10}$$

Можно показать, что поиск минимального значения в данной задаче эквивалентен задаче на поиск следующего максимума

$$2\Theta(\boldsymbol{\xi}) = \max\Big\{ \min\big\{\xi_{i_2,j_1} - \xi_{i_1,j_1}, \xi_{i_1,j_2} - \xi_{i_2,j_2}\big\} \ \Big| \\ i_1, i_2 = 1, \ldots, n,\ j_1, j_2 = 1, \ldots, m\colon \\ \xi_{i_2,j_1} > \xi_{i_1,j_1},\ \xi_{i_1,j_2} > \xi_{i_2,j_2}\Big\}. \tag{11}$$

Оценивание параметра формы сигнала. Приведем метод построения оценки параметра

формы [7] сигнала с использованием предложенного подхода. Будем считать, что модель формирования сигнала аналогична (1), шум ограничен, и его амплитуда не превышает $\delta > 0$, а форма сигнала задана параметрически:

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{h} + \boldsymbol{\nu}, \quad \boldsymbol{h}, \boldsymbol{\nu} \in \mathbb{R}^{n\times m}, \quad |\nu_{i,j}| \leqslant \delta; \tag{12}$$

$$\boldsymbol{h} \in \mathbb{V}_{mf}(\boldsymbol{\lambda}), \quad \boldsymbol{\lambda} \in \Lambda; \tag{13}$$

$$\mathbb{V}_{mf}(\boldsymbol{\lambda}) = \big\{\boldsymbol{g} \in \mathbb{R}^{n\times m} \colon \boldsymbol{g}_{\cdot,j} \in \mathbb{R}^n, \\ \boldsymbol{g}_{\cdot,j} = \mathrm{B}_{j,\boldsymbol{\lambda}} \circ F_j \circ \boldsymbol{f},\ \boldsymbol{f} \in R^n\big\} \subset \mathbb{R}^{n\times m}, \tag{14}$$

где $B_{j,\boldsymbol{\lambda}} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n,\ j = 1, \ldots, m$ — параметрически заданные обратимые операторы, не сводимые к монотонным преобразованиям (4). Требуется оценить значение параметра $\boldsymbol{\lambda}$. Применительно к задаче мониторинга операторы

$$B_{j,\boldsymbol{\lambda}} = B_{\lambda_j} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \quad (B_{\lambda_j} \circ \boldsymbol{f})_i = f_{i+\lambda_j}$$

— операторы временной задержки сигнала на целое число интервалов дискретизации сигнала $\lambda_j = -t_{\max}, \ldots, t_{\max}$, где $t_{\max} > 0$ — максимально допустимая задержка.

Задачу оценивания параметра $\boldsymbol{\lambda} \in \Lambda$ (Λ — нормированное пространство возможных $\boldsymbol{\lambda}$) поставим как задачу на минимакс:

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}} = \arg\inf_{\boldsymbol{\lambda}\in\Lambda} \sup_{\tilde{\boldsymbol{\lambda}}\in\Lambda_\delta(\boldsymbol{\xi})} \|\boldsymbol{\lambda} - \tilde{\boldsymbol{\lambda}}\|, \tag{15}$$

где $\Lambda_\delta(\boldsymbol{\xi})$ — множество таких $\boldsymbol{\lambda} \in \Lambda$, что выполняется модельное предположение (12)–(14). Условие выполнения этого предположения эквивалентно тому, что

$$\Theta(\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\xi}) \leqslant \delta, \tag{16}$$

$$(\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\xi})_{\cdot,j} = B^{-1}_{j,\boldsymbol{\lambda}}\, \boldsymbol{\xi}_{\cdot,j} \in \mathbb{R}^n, \quad j = 1, \ldots, n. \tag{17}$$

Решением задачи (15) является середина шара минимального размера, содержащего в себе все множество $\Lambda_\delta(\boldsymbol{\xi})$. Если это множество не пусто, то нет причин отвергать используемую модель измерения. Если же оно не содержит ни одного элемента, то модель противоречива и должна быть отвергнута. Формально можно ввести числовую характеристику адекватности модели:

$$\alpha(\boldsymbol{\xi}) = \begin{cases} 1, & \Lambda_\delta(\boldsymbol{\xi}) \neq \varnothing; \\ 0, & \Lambda_\delta(\boldsymbol{\xi}) = \varnothing. \end{cases} \tag{18}$$

Функцию $\alpha(\boldsymbol{\xi})$, следуя теории измерительно-вычислительных систем [8], назовем надежностью модели.

Приведем алгоритм определения параметра формы.

1. Строится множество $\tilde{\boldsymbol{\lambda}} \in \Lambda_\delta(\boldsymbol{\xi})$, таких, что (16).
2. Проверяется адекватность модели, согласно (18). Если модель неадекватна, происходит отказ от оценивания параметра.
3. В случае адекватности модели, строится оценка параметра согласно решению задачи (15): наиболее точной минимаксной оценкой параметра будет центр шара пространства Λ минимального радиуса, целиком содержащего в себе множество $\Lambda_\delta(\boldsymbol{\xi})$, а оценкой погрешности оценивания — радиус этого шара.

Выводы

В работе предложен метод сравнения по форме нескольких сигналов, порожденных общим сигналом — прообразом путем монотонного преобразования его значений при наличии ограниченного шума, моделирующего погрешности, сопровождающие процесс регистрации.

Приводится способ применения метода для оценки параметров формы таких сигналов, получения погрешности оценивания и проверки адекватности используемой модели.

Литература

[1] *Пытьев Ю. П., Чуличков А. И.* Морфологические методы анализа изображений. — М.: Физматлит, 2010. — 336 с.

[2] *Olson J. V., Szuberla C. A. L.* The Least Squares Estimation of the Azimuth and Velocity of Plane Waves // Inframatics. — 2004. — N. 6. — Pp. 9–12.

[3] *O'Shea P.* Phase Measurement — The Measurement, Instrumentation and Sensors Handbook. Chapter 41. — Springer, 1999.

[4] *Pichon A. Le, Cansi Y.* PMCC for Infrasound Data Processing // Inframatics. — 2003. — N. 2. — Pp. 1–9.

[5] *Olson J. V.* Infrasound Signal Detection using the Fisher F-Statistic // Inframatics. — 2004. — N. 6. — Pp. 1–7.

[6] *Wilson C. R., Olson J. V.* Frequency Domain Coherence Between High Trace-Velocity Infrasonic Signals at 153US and Video Data from Pulsating Aurora // Inframatics. — 2005. — N. 9. — Pp. 27–30.

[7] *Chulichkov A. I., Kulichkov S. N., Demin D. S.* Estimation of the delay times of signals on the basis of their shape analysis // Moscow University Physics Bulletin. — 2007. — V. 62, N. 6. — Pp. 352–356.

[8] *Пытьев Ю. П.* Методы математического моделирования измерительно-вычислительных систем. — М.: Физматлит, 2004. — 400 с.

Алгоритм обработки сигналов на основе параметрического динамического программирования*

Копылов А. В.[1]***, Красоткина О. В.***[1]***, Моттль В. В.***[2]***, Приймак А. Ю.***[3]
And.Kopylov@gmail.com, ko180177@yandex.ru, vmottl@yandex.ru, aleksandr.priymak@gmail.com
Тула, Тульский государственный университет.[1], Москва, ВЦ им. Дородницына РАН[2], Москва, МФТИ.[3]

Предлагается новый алгоритм низкоуровневой обработки сигналов на основе принципа динамического программирования. Показано, что возможно применить процедуру динамического программирования для случая непрерывных целевых переменных путем введения параметрического семейства функций Беллмана, представленного как минимум из набора квадратичных функций. Такая процедура позволяет учитывать широкий набор априорный предположений о характере результата обработки и приводит к эффективным алгоритмам анализа данных.

A signal processing algorithm based on parametric dynamic programming*

Kopylov A. V[1]***, Krasotkina O. A.***[1]***, Mottl V. V.***[2]***, Pryimak O. U.***[3]
Tula State University[1], Tula, Russia, Dorodnicyn Computing Centre of RAS[2], Moscow, Russia,
Moscow Institute of Physics and Technology[3], Moscow, Russia

A new algorithm for low-level signal processing is proposed based on dynamic programming principle. It is shown that it is possible to extend the dynamic programming procedure to the case of continuous variables by introducing the parametric family of Bellman functions, represented as a minimum of a set of quadratic functions. The procedure can take into account a wide range of prior assumptions about the sought-for result, and leads to the effective algorithms of data analysis.

Многие часто встречающиеся задачи обработки и анализа сигналов, например различные виды сглаживания, регрессионный анализ, сегментация и др., могут быть формализованы как задачи преобразования исходного массива данных $Y = (y_t, \mathbf{t} \in T),\ Y \in \mathcal{Y}$ во вторичный массив $X = (x_t, \mathbf{t} \in T),\ X \in \mathcal{X}$. В данной работе мы будем рассматривать сигналы дискретного времени, $T = \{1, \ldots, N\}$. Важно заметить, что в этом случае ось сигнала снабжена естественным отношением попарной смежности, превращающим ее в простейший граф в виде цепи.

Задача нахождения наилучшего, в некотором смысле, преобразования массива данных Y, представляющего исходный сигнал, во вторичный массив X может быть поставлена математически как задача минимизации целевой функции $J(X)$ специального вида. Такая функция определена на множестве всех мыслимых результатов обработки, и выступает в качестве меры несоответствия каждой возможной версии результата обработки X и исходных данных Y.

$$J(X) = \sum_{\mathbf{t} \in T} \psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}}) + \sum_{(\mathbf{t}', \mathbf{t}'') \in G} \gamma_{\mathbf{t}'}(x_{\mathbf{t}'}, x_{\mathbf{t}''}). \qquad (1)$$

Структура целевой функции (1) отражает тот факт, что данные упорядочены вдоль оси одного аргумента, и определяется графом смежности переменных $G \subset T \times T$, имеющим для сигналов вид цепи. Такие функции будем называть парно-сепарабельными, поскольку они представляют собой сумму элементарных целевых функций не более чем двух аргументов. Эти элементарные функции ассоциированы с узлами и ребрами графа смежности.

Функции $\psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}})$, связанные с узлами графа смежности и называемые в дальнейшем узловыми функциями, выбираются исходя из специфики каждой конкретной задачи, и принимают тем большее значение, чем менее согласуется значение целевой переменной $x_{\mathbf{t}}$ со значениями исходных данных $Y_{\mathbf{t}}$ в соответствующей окрестности элемента $\mathbf{t}$. Функции двух аргументов $\gamma_{\mathbf{t}'}(x_{\mathbf{t}'}, x_{\mathbf{t}''})$, связанные с ребрами графа смежности и называемые функциями связи, выражают априорные предположения о результате обработки в форме определенного вида штрафа на различие значений соседних целевых переменных, связанных ребром графа смежности $(\mathbf{t}', \mathbf{t}'') \in G$.

В случае, если целевые переменные принимают значения из конечного множества $x_{\mathbf{t}} \in \mathscr{X} = \{1, \ldots, m\}$, задача поиска минимума целевой функции (1) известна как (min,+) задача разметки. Для графа смежности произвольного вида это NP-трудная задача, однако для ациклических графов, к которым принадлежит и цепь, возможно построение довольно эффективных в вычислительном плане процедур на основе принципа динамического программирования. Но с ростом числа элементов множества $\mathscr{X}$ затраты времени и памяти компьютера очень быстро становятся неприемлемо высокими.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 10-07-00489, 09-01-12085, 09-07-00394.

Тем не менее, возможно построить обобщение классической процедуры динамического программирования на случай непрерывных целевых переменных [1, 2]. Такое обобщение может быть выполнено при помощи концепции параметрического семейства функций Беллмана. Это позволяет, во-первых, снизить требования к памяти, если число параметров функций Беллмана меньше количества элементов множества $\mathscr{X}$, во-вторых уменьшить время вычислений, поскольку решение промежуточных задач минимизации превращается в рекуррентный пересчет параметров, в-третьих, повысить точность решения тех задач, где целевые переменные имеют непрерывную природу. К сожалению, класс параметрических семейств функций Беллмана слишком беден, что сильно ограничивает прикладное применение параметрических процедур динамического программирования.

В данной работе рассматривается способ расширения класса параметрических семейств функций Беллмана для наиболее часто используемых на практике видов целевых функций.

Обобщенная процедура динамического программирования

Задача глобальной минимизации парно-сепарабельной целевой функции (1) с последовательной смежностью переменных может быть решена на основе классической процедуры динамического программирования [3]. Процедура основана на рекуррентной декомпозиции исходной задачи оптимизации по всем переменным на последовательность частных задач оптимизации с промежуточными функциями только одной переменной, называемыми функциями Беллмана. Хотя процедура динамического программирования хорошо известна, мы все же рассмотрим ее здесь, главным образом для того, чтобы ввести понятия и терминологию, которые понадобятся в дальнейшем.

Функции Беллмана связаны прямым рекуррентным соотношением

$$\tilde{J}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}) = \psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}}) + \\ + \min_{x_{\mathbf{t}-1} \in \mathscr{X}} \Big[\gamma_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}, x_{\mathbf{t}-1}) + \tilde{J}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1}) \Big]. \quad (2)$$

Прямое рекуррентное соотношение (2) позволяет определять их последовательно для возрастающих моментов времени $\mathbf{t} = 1, 2, \ldots$, начиная с известной первой функции $J_1(x_1) = \psi_1(x_1 \,|\, Y_1)$. Очевидно, что глобальный минимум функции Беллмана от последней переменной совпадает с глобальным минимумом полной целевой функции по всем переменным, поэтому значение последней переменной, минимизирующее ее функцию Беллмана

$$\hat{x}_N = \arg\min_{x_N \in \mathscr{X}} \tilde{J}_N(x_N), \quad (3)$$

является оптимальным значением этой переменной в составе искомой оптимальной совокупности. Таким образом, чтобы найти оптимальное значение последней переменной и положить тем самым начало решению задачи оптимизации в целом, достаточно выразить последнюю функцию Беллмана в некотором удобном виде, а затем найти точку ее минимума. Для этого придется решить задачу глобальной минимизации функции одной переменной, причем метод динамического программирования не указывает, как это сделать. Последняя функция Беллмана может быть найдена как итог рекуррентной процедуры последовательного поиска этих функций для всех переменных, начиная с узловой функции в начальный момент времени. Основной операцией в составе такой рекуррентной процедуры оказывается опять же операция глобальной минимизации функции одной переменной. Остальные элементы искомого решения могут быть найдены путем применения обратного рекуррентного соотношения для $\mathbf{t} = N, N-1, \ldots, 1$:

$$x_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}}) = \arg\min_{x_{\mathbf{t}-1} \in \mathscr{X}} \Big[\gamma_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}, x_{\mathbf{t}-1}) + \tilde{J}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1}) \Big]. \quad (4)$$

Таким образом, каковы бы ни были узловые функции $\psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}})$ и функции связи $\gamma_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}, x_{\mathbf{t}-1})$ в составе парно-сепарабельной целевой функции $J(X)$ с цепочечной смежностью переменных, алгоритм динамического программирования находит точку ее глобального минимума, если, конечно, такая комбинация значений переменных существует в пределах области их варьирования, выполняя при этом заранее известное конечное число операций, пропорциональное числу переменных.

В случае непрерывных целевых переменных, например, если $x_{\mathbf{t}} \in \mathscr{X} \subseteq \mathbb{R}^n$, численная реализация процедуры динамического программирования возможна лишь если существует конечно-параметрическое семейство функций $\tilde{J}(x, \mathbf{a})$ замкнутое относительно функций $\psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}})$ и $\gamma_{\mathbf{t}'}(x_{\mathbf{t}'}, x_{\mathbf{t}''})$ в том смысле, что функции Беллмана $\tilde{J}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}})$ на каждом шаге принадлежат этому семейству. В этом случае, процедура оптимизации состоит в рекуррентном пересчете параметров $\mathbf{a}_{\mathbf{t}}$, которые полностью представляют функции Беллмана $\tilde{J}_{\mathbf{t}}(x) = \tilde{J}(x, \mathbf{a}_{\mathbf{t}})$. В частности, как показано в [1], если узловые функции и функции связи квадратичные, то функции Беллмана также представляют собой квадратичные функции. В этом случае процедура динамического программирования полностью эквивалентна фильтру и интерполятору Калмана-Бьюси [3]. Однако априорные ограничения в форме квадратичных функций не позволяют сохранить резкие изменения данных в процессе обработки. Параметрическая реализация также возможна при использовании модуля разности значений смежных целевых переменных в качестве функции

связи, что соответствует предположению о кусочно-постоянной форме искомого результата обработки [2]. Хотя предположения такого вида хорошо подходят для некоторых экономических задач и задач отбора признаков в распознавании образов [4], в общем случае такие предположения оказываются не слишком адекватны задаче обработки сигналов с сохранением локальных особенностей. Предположение о том, что значения искомого массива данных меняются достаточно плавно, за исключением относительно редких скачков, может быть выражено при помощи узловых функций следующего вида:

$$\gamma_{\mathbf{t}'}(x_{\mathbf{t}'}, x_{\mathbf{t}''}) = \min\left[(x_{\mathbf{t}'} - x_{\mathbf{t}''})^{\intercal} U_{\mathbf{t}'}(x_{\mathbf{t}'} - x_{\mathbf{t}''}), h\right]. \quad (5)$$

Такие функции довольно часто встречаются в алгоритмах анализа данных [5]. Пусть узловые функции также выбраны квадратичными $\psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}}) = (y_{\mathbf{t}} - x_{\mathbf{t}})^{\intercal} B_{\mathbf{t}}(y_{\mathbf{t}} - x_{\mathbf{t}})$. В этом случае оказывается возможным построить параметрическую процедуру динамического программирования для минимизации критерия (1). Можно показать, что если функция Беллмана в узле $\mathbf{t}-1$ имеет вид

$$\tilde{J}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1}) = \min\left[\tilde{J}^{(1)}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1}), \ldots, \tilde{J}^{(K_{\mathbf{t}-1})}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1})\right], \quad (6)$$

то следующая функция Беллмана будет

$$\tilde{J}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}) = \min\left[\tilde{J}^{(1)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}), \ldots, \tilde{J}^{(K_{\mathbf{t}})}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}})\right], \quad (7)$$

где $K_{\mathbf{t}} = K_{\mathbf{t}-1} + 1$.

В соответствии с (2),

$$\tilde{J}^{(i)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}) = \psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}}) + \min_{x_{\mathbf{t}-1} \in \mathscr{X}}\left[(x_{\mathbf{t}} - x_{\mathbf{t}-1})^{\intercal} U_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} - x_{\mathbf{t}-1}) + \tilde{J}^{(i)}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1})\right], \quad i = 1, \ldots, K_{\mathbf{t}-1}; \quad (8)$$

$$\tilde{J}^{(K_{\mathbf{t}})}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}) = \psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}}) + \min_{x_{\mathbf{t}-1} \in \mathscr{X}}\left[h + \tilde{J}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1})\right].$$

Легко видеть, что каждая функция $\tilde{J}^{(i)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}})$ имеет параметрическое представление:

$$\tilde{J}^{(i)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}) = \left(x_{\mathbf{t}} - x^{(i)}_{\mathbf{t}}\right)^{\intercal} R^{(i)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} - x^{(i)}_{\mathbf{t}}) + d^{(i)}_{\mathbf{t}}, \; i = 1, \ldots, K_{\mathbf{t}}.$$

Обратное рекуррентное соотношение (4) принимает вид:

$$x^{(i)}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}}) = \arg\min_{x_{\mathbf{t}-1} \in \mathscr{X}}\Big\{\min\left[f^{(1)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}-1}, x_{\mathbf{t}}), \ldots, f^{(K_{\mathbf{t}-1})}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}-1}, x_{\mathbf{t}}), f^{(K_{\mathbf{t}})}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}-1}, x_{\mathbf{t}})\right]\Big\},$$

где

$$f^{(i)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}-1}, x_{\mathbf{t}}) = (x_{\mathbf{t}} - x_{\mathbf{t}-1})^{\intercal} U_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} - x_{\mathbf{t}-1}) + \tilde{J}^{(i)}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1}),$$

$$i = 1, \ldots, K_{\mathbf{t}-1}, \; f^{(K_{\mathbf{t}})}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}-1}) = h + \tilde{J}^{(i)}_{\mathbf{t}-1}(x_{\mathbf{t}-1}).$$

Пусть $\tilde{J}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}) = \min\left[\tilde{J}^{(1)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}), \ldots, \tilde{J}^{(K_{\mathbf{t}})}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}})\right]$.
Если для любого $x_{\mathbf{t}} \in \mathscr{X}$,

$$\tilde{J}^{(1)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}) \geqslant \min\left[\tilde{J}^{(2)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}), \ldots, \tilde{J}^{(K_{\mathbf{t}})}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}})\right], \text{ то}$$

$$\tilde{J}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}) = \min\left[\tilde{J}^{(2)}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}), \ldots, \tilde{J}^{(K_{\mathbf{t}})}_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}})\right].$$

Таким образом, количество квадратичных функций в представлении функции Беллмана на шаге $\mathbf{t}$ может быть уменьшено. Способ такого уменьшения будет рассмотрен в следующем разделе на примере процедуры сглаживания сигнала с сохранением локальных особенностей.

Параметрическая процедура динамического программирования для сглаживания сигналов с сохранением локальных особенностей

Пусть модель наблюдаемого сигнала имеет следующий вид: $Y = (y_t = x_t + \xi_t, \; t = 1, \ldots, N)$, $y_t \in \mathbb{R}$, где ξ — аддитивный нормальный белый шум с нулевым средним. Цель обработки заключается в восстановлении скрытого сигнала $X = (x_t, \; t = 1, \ldots, N)$, $x_t \in \mathbb{R}$. Основное предположении о характере скрытого сигнала X состоит в том, что он изменяется достаточно плавно, за исключением, может быть, нескольких точек, в которых наблюдается резкий скачек или разрыв.

В соответствии с данным предположением выберем функции связи в форме (5):

$$\gamma_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}}, x_{\mathbf{t}-1}) = u \min[(x_{t-1} - x_t)^2, \Delta^2]. \quad (9)$$

Узловые функции характеризуют квадрат отклонения искомого сигнала от исходных данных к каждой точке сигнала $\psi_{\mathbf{t}}(x_{\mathbf{t}} \,|\, Y_{\mathbf{t}}) = (y_t - x_t)^2$. В этом случае целевая функция примет следующий простой вид:

$$J(X) = \sum_{t=1}^{N} (y_t - x_t)^2 + u \sum_{t=2}^{N} \min[(x_{t-1} - x_t)^2, \Delta^2]. \quad (10)$$

Соответственно, прямое рекуррентное соотношение (2) примет вид:

$$\tilde{J}_t(x_t) = \min\left[\tilde{J}^{(1)}_t(x_t), \ldots, \tilde{J}^{(K)}_t(x_t)\right];$$

$$\tilde{J}^{(i)}_t(x_t) = (y_t - x_t)^2 + \min_{x_{t-1}}[u(x_{t-1} - x_t)^2 + J^{(i)}_{t-1}(x_{t-1})];$$

$$\tilde{J}^{(K)}_t(x_t) = (y_t - x_t)^2 + \min_{x_{t-1}}\left[u\Delta^2 + \tilde{J}_{t-1}(x_{t-1})\right]. \quad (11)$$

Таким образом, каждая функция Беллмана имеет конечно-параметрическое представление, и можно показать, что в общем случае количество квадратичных функций, требующихся для ее представления, на каждом шаге увеличивается не более чем на единицу. Это приводит к тому, что общая

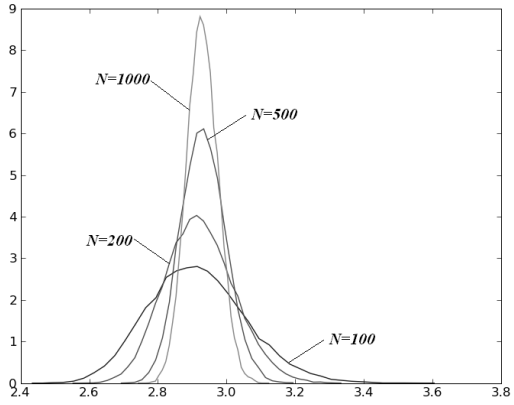


Рис. 1. Плотность распределения среднего количества квадратичных функций, необходимых для представления функций Беллмана.

вычислительная сложность процедуры сглаживания сигналов с сохранением локальных особенностей будет $O(N^2)$. В тоже время, многочисленные эксперименты на модельных данных показывают, что две или три квадратичных функции в большинстве случаев полностью описывают очередную функцию Беллмана. Модификация алгоритма рекуррентного пересчета функций Беллмана основана на следующей идее. Легко видеть, что если $\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_N$ является точкой минимума целевой функции (10), то $\hat{x}_t \in [m, M]$, для всех $t = 1, \ldots, N$, где $m = \min(Y)$, а $M = \max(Y)$. Следовательно, можно не учитывать все $\tilde{J}_t^{(i)}(x_t) \geqslant \min\limits_{i \neq j} \left[\tilde{J}_t^{(i)}(x_t)\right]$, для $x_t \in [m, M]$.

Обозначим количество функций, необходимых для представления функции Беллмана на каждом шаге через $m_1, \ldots, m_N$. Можно доказать, что если существует такое $P = \text{const}$, что

$$m_1^2 \ln m_1^2 + \cdots + m_N^2 \ln m_N^2 \leqslant P \cdot N,$$

то процедура имеет вычислительную сложность $O(N)$.

Результаты экспериментов

Для экспериментального исследования алгоритма сглаживания сигнала с сохранением локальных особенностей были использованы следующие модельные данные. Наблюдаемый сигнал: $Y = (y_t = x_t + \xi_t,\ t = 1, \ldots, N)$, $y_t \in \mathbb{R}$, где ξ — аддитивный нормальный белый шум с нулевым средним и дисперсией σ^2. Скрытый сигнал: $X = (x_t,\ t = 1, \ldots, N)$, где $x_1 = z_1$, $x_t = x_{t-1}$, с вероятностью p, и $x_t = z_t$, с вероятностью $1 - p$ для $t = 2, 3, \ldots, N$. Случайные величины z_t независимые, равномерно распределенные на интервале $[0, 50]$. На рисунке 1 показана плотность распределения среднего количества квадратичных функций, необходимых для представления функций Беллмана $(m_1 + \cdots + m_N)/N$, полученная методом Монте-Карло для $N = 100, 200, 500, 1000$.

Вероятность того, что число функций для представления функции Беллмана превысит четыре крайне мала, что подтверждает оценку вычислительной сложности процедуры в среднем как $O(N)$.

Выводы

Процедура динамического программирования на основе параметрического семейства функций Беллмана, представляющего собой минимум из набора квадратичных функций, позволяет снизить количество требуемой для обработки данных памяти, если общее количество параметров функций меньше, чем количество элементов для дискретного представления функций Беллмана конечным множеством значений. В то же время результаты экспериментов показывают, что в большинстве случаев две или три квадратичных функции достаточны для полного представления функций Беллмана. Предлагаемая параметрическая процедура позволяет учитывать более широкий класс априорных предположений о результате обработки, чем известные параметрические процедуры на основе динамического программирования, и позволяет строить эффективные в вычислительном плане алгоритмы обработки сигналов с линейной вычислительной сложностью.

Литература

[1] *Mottl V. V, Kopylov A. V, Blinov A. B, Kostin A. A* Optimization techniques on pixel neighborhood graphs for image processing // Graph-Based Representations in Pattern Recognition. Computing, Supplement 12. Springer-Verlag/Wien, 1998. — Pp. 135–145.

[2] *Kopylov A. V.* Parametric dynamic programming procedures for edge preserving in signal and image smoothing // Pattern Recognition and Image Analysis. — V. 15, No. 1. — 2005. — Pp. 227–230.

[3] *Kalman R. E., Bucy R. S.* New Results in Linear Filtering and Prediction Theory // Journal of Basic Engineering. — 1961. — V. 83. — Pp. 95–108.

[4] *O. Seredin, A. Kopylov, V. Mottl* Selection of Subsets of Ordered Features in Machine Learning // Transactions on Machine Learning and Data Mining. — 2009. — V. 2, N. 2. — Pp. 65–79.

[5] *R. Szeliski, R. Zabih, D. Scharstein, O. Veskler, V. Kolmogorov, A. Agarwala, M. Tappen, C. Rother.* A Comparative Study of Energy Minimization Methods for Markov Random Fields with Smoothness-Based Priors // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence (PAMI). — 2008. — V. 30, N. 6. — Pp. 1068–1080.

Multicomponent simulation and forecasting of a complex natural signal

Mandrikova O. V., Geppener V. V., Goreva T. S., Klionskiy D. M.
oksanam1@mail.kamchatka.ru, geppener@mail.ru, tatyana-goreva@yandex.ru, klio2003@list.ru
Saint-Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint-Petersburg, Russia

The present paper is devoted to the research and development of simulation, analysis and forecasting methods with regard to geophysical monitoring signals. With the use of a non-linear approximating scheme an adaptive model of a complex natural signal has been constructed. This model is entirely based on the internal structure of the original data. Furthermore, the components that form the signal during in different time periods have been extracted. The efficiency of all the methods suggested and expounded in the following is illustrated by the example of the critical frequency f_0F2 signal processing.

Problem definition

Simulation and intellectual analysis of complex natural signals plays a very important part in solving a great number of theoretical and applied problems in the realms of atmospheric and ionospheric physics, and wave propagation. Model construction and the corresponding approaches to natural signal processing allow us to obtain qualitative estimates of processes from different systems, discover complicated internal connections present in the system, and determine the schemes that characterize the interaction of system elements. Furthermore, it is possible to create special models capable of predicting the behavior of the process in question. The main difficulties in solving the aforementioned problems in the automatic mode are mainly connected to the complex structure of natural signals recorded by specially designed equipment monitored by experts in geophysics, seismology and other related domains. Natural signals encompass various transient processes, local characteristics, and abnormal effects caused by the activity of the Sun, ionospheric and lithospheric processes and their influence on each other. In seismically active regions, such processes may arise prior to destructive seismic phenomena. Local features and abnormal effects are usually recognized by the characteristic patterns in the time domain, which manifest as abrupt bursts, peaks, and stepwise structures. Such features contain useful information about the natural processes and they should not be filtered and removed as noise, or as an interfering signal, because that would cause inevitable and irreversible information loss.

Based on various signal properties and error distributions, different time series models are considered, and the analytic methods employed are subject to changes. The main goals of signal analysis are structure exploration and forecasting. Both of these require us to have a time series model identified and represented formally. The complex structure of natural signals can make it inefficient and ineffective to apply traditional methods of time series analysis including spectral analysis, smoothing procedures, and time series models formed as a superposition of trends, oscillating components and seasonal components. These methods characterize a rather narrow class of processes and their successful application depends largely on whether we have a priori information regarding the time series.

Contemporary methods of signal approximation based on expanding functions into wavelet bases and adaptive data-driven algorithms, developed with the help of approximation methods enable us to find approximations with a sufficient accuracy using a small number of parameters. It also becomes possible to use wavelet bases for processing arbitrary natural signals because of the diversity of wavelet basis functions. Wavelets have already been demonstrated to work well in tasks involving discrete-time sequence processing, subtle pattern extraction, local feature discovery and classification, denoising and detrending. On the basis of numerous wavelet algorithms, we have conceived, developed and implemented a multicomponent simulation and forecasting method, which encompasses noise suppression, signal component extraction, and the automatic identification of the components. The method is aimed at adaptively determining the approximation functions, it preserves information regarding the process considered. The key concept behind the signal model construction is that of non-linear approximation wavelet-based algorithms. The model parameters estimation is performed with the autoregression (AR) integrated moving average method that is widespread in signal processing and statistics, and these models have been gained popularity in geophysics and physics. The estimates that they provide can usually be interpreted easily, and are frequently used as a means of real signal model construction. Their other advantage is the existence of fast effective techniques for the detection of changes in model parameters. Having done such detection, it becomes possible to extract information about abnormal effects in the original time series and classify these effects.

Method description

An arbitrary signal with a complex structure can be represented as a sum of non-uniformly scaled or-

thogonal components f_i [2]:

$$f(t) = x_1 f_1(t) + x_2 f_2(t) + \cdots + x_n f_n(t); \quad (1)$$

$$\sum_i g_i f_j(t_i) f_k(t_i) = \delta_{jk}, \quad (2)$$

where g_i - weighting coefficients, $k = \overline{1,n}$, $j = \overline{1,n}$.

Since the components have different structures susceptible to change at random time points, we arrange the main steps of their identification by means of approximation methods based on function decomposition in terms of a basis from the $L^2(\mathbb{R})$ space:

$$f_i(t) = \sum_k c_{ik} \psi_{ik}(t),$$

where ψ_{ik} are basis functions of the $L^2(\mathbb{R})$ space.

Taking into account the nature of the signals' features, their non-uniform scale and the diversity of their patterns in the time domain, wavelets are the most suitable basis for signal representation. Wavelet coefficients $c_{ik} = \langle f, \psi_{ik} \rangle$ are a result of mapping f into the new space with resolution i.

For the purpose of constructing models that are adaptive to signal structure, we further use non-linear approximation schemes. In this case, the approximation of f is carried out by M vectors that depend on a signal structure:

$$f_M = \sum_{m \in I_m} \langle f, \psi_m \rangle \psi_m,$$

where I_m is the set of indices defined by the structure of f.

Consider a space with the resolution $i = 0$ as a reference space for a discrete-time signal

$$V_0 = \mathrm{clos}_{L^2(\mathbb{R})}\big(\varphi(t-k)\big),\ k \in \mathbb{Z}.$$

where clos is the $L^2(\mathbb{R})$-closure of the linear span of the integer translates of φ.

In this case the zero level of detailing (refinement) f_0 corresponds to the interval of data recording.

Applying a decomposition construction and wavelet-packets to the original signal we will get the V_0 space decomposition scheme:

$$W_0 = \oplus_{i=1}^{2^m - 1} W_{-j_i} \oplus V_{-n},$$

where $W_0 = V_0$; W_{-j_i} is the wavelet-packet space. The signal embedded in noise will be represented as

$$y_0(t) = \sum_{-j_i} \Big(g_{-j_i} + e_{-j_i} \Big) + f_{-m},$$

$$y_0(t) = f_1(t) + f_2(t) + e(t),$$

where the components

$$f_1(t) = \sum_{-j_i, k \in I_m} d_n^{-j_i} \psi_{-j_i,k}(t),$$

$$f_2(t) = \sum_k c_k^{-n} \varphi_{-n,k}(t)$$

are uniquely defined by coefficient sequences

$$\bar{d}^{\,-j_i} = \{d_k^{-j_i}\}_{k \in Z},$$

$$\bar{c}^{\,-n} = \left\{c_k^{-n}\right\}_{k \in Z},$$

$$\bar{d}_k^{\,-j_i} = \langle f, \psi_{-j_i,k} \rangle,$$

$$\bar{c}_k^{\,-n} = \langle f, \varphi_{-n,k} \rangle,$$

and the component $e(t)$ represented by

$$\bar{e}_k^{\,-j} = \langle e, \psi_{-j_i,k} \rangle$$

is the first noise component.

The component extracted $f_1(t) = \sum g_{-j}$ is the detailing signal component and reflects local features of its structure, whereas the smoothed component $f_2(t) = f_{-n}$ contains stable characteristics of a signal structure.

Components g_{-j_i} and f_{-n} have a simpler structure in comparison with the original signal f and owing to condition (2) these components are uncorrelated. Property (2) thus allows us to identify models for each component and combine the representations obtained on the basis of (1). As a result, a signal model can be declared to be formed.

The numerical approach to component g_{-j_i} and f_{-n} identification is described in [1, 3], and includes the following stages [3]:

1) noise component $e(t)$ suppression;
2) selection of an approximation wavelet basis ψ_m;
3) signal component extraction.

The signal components which have been determined (g_{-j_i} and f_{-n}) are approximated by an AR model:

In order to identify the AR-model an iterative approach can be tried:

1) a suitable class of models is taken;
2) preliminary estimates of model parameters are calculated;
3) diagnostic tests help detect possible errors of the model created at stage 2. If the errors satisfy particular requirements formed with the use of prior knowledge, the model is considered complete, and it can be put into practice.

Stages 1)–3) constitute the intermediate stage of the entire sequence of operations directed at identifying the signal multicomponent model. When fitting

the model, these stages must be completed for different signal components, and depending on the diagnosis test results for a particular AR model, we can identify the final model structure, which can be written as

$$f(t) = \sum_{j,k} s_k^j \psi_{j,k}(t); \tag{3}$$

$$s_k^j(t) = \sum_{l=1}^{p_j} \gamma_l^j w_{k-l}^j(t), \tag{4}$$

where γ_l^j are autoregression coefficients of a model component for scale j, $w_k^j(t) = \nabla^d r_k^j(t)$,

$$r_k^j = \{d_k^{-j_i}, c_k^{-n}\}_{-j_i, -n \in I_m},$$

p_j is AR model order for scale j, ∇^d is a backward difference operator of the order d.

Forecasting the value s_{k+q}^j, $q \geqslant 1$, defines the prediction s_k^j at time point $t = k$ with the delay q. The value s_{k+q}^j can be expressed with the help of (3) as follows:

$$s_{k+q}^j(t) = \sum_{l=1}^{p_j} \gamma_l^j w_{k+q-l}^j(t).$$

Simulation of critical frequency f_0F2 signals

Since 1968 f_0F2 (critical frequency of the ionospheric layer) data collection in Russia has been entrusted to the Institute of Cosmophysical Research and Wave Propagation (Far East branch of the Russian Academy of Sciences) located in Petropavlovsk-Kamchatski (Kamchatka peninsula, Far East, Russia). The ionospheric structure and the distribution of its parameters over frequency depend on the atmospheric density, its chemical composition and spectral characteristics of solar radiation. Against the background of regularly occurring changes caused by diurnal and seasonal variation, signals responsible for representing logged ionospheric parameters may contain abnormal effects in which the duration varies from several tens of minutes to several hours. These abnormal phenomena arise in the presence of powerful ionospheric perturbations caused by the solar activity. Numerous investigations recently conducted in the middle and upper atmosphere have revealed connections in the development of phenomena in the lithosphere and magnetosphere, and these phenomena are associated with solar activity. The problem of automatic extraction and classification of such features is very important. Critical frequency variations have a complicated multiscale structure and often contain missing values, which makes it more difficult to construct models for such signals, and also makes it inefficient to directly apply conventional methods of time series simulation

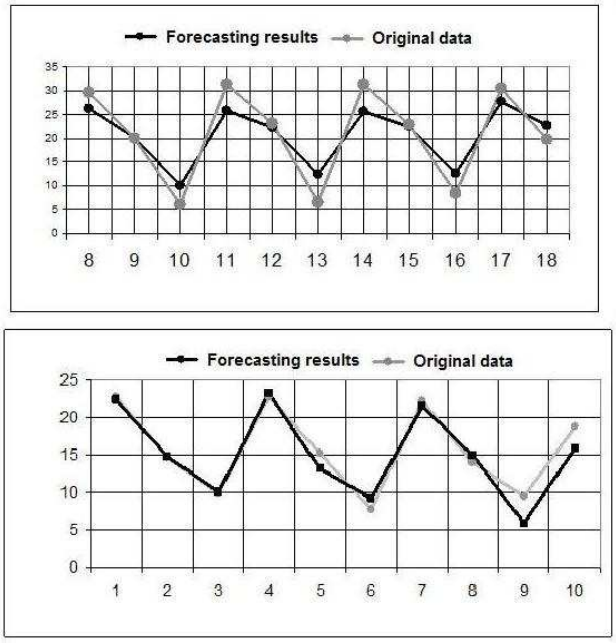


Fig. 1. Critical frequency signal forecasting for a seismically quiet winter period: top — 2004; bottom — 2000.

to them. Models of f_0F2 were built and data forecasting and analysis were carried out with a goal of estimating missing values and performing data analysis using the novel multicomponent method.

During the experiments, we processed f_0F2 data that were recorded at a sampling rate of one hour during the period from 1999 to 2005. MATLAB was the programming language chosen to create the software. Taking into account the seasonal nature of ionospheric signals, decomposition was carried out for each year.

When extracting wavelet components at the next level, a smoothed, simpler component f_{-n} is obtained, which both facilitates the procedure of AR-model identification and reduces the model order. Part of the information from the original signal is transferred to the components obtained in the next step. During the processing, f_0F2 signals were decomposed up to the third level, noise component suppression was performed, and separate structural units f_{-j_i} and f_{-n}, were extracted to show their contributions to the original signal at different time points (Fig. 1). For each of the components obtained, AR models were identified for the components obtained. The component model f_{-n} characteristics calculated over a period of several years are given in Table 1. The forecasting results of the f_{-n} component values with the delay equal to six samples for a third-level component in the wavelet decomposition (corresponding to 70 samples of a reconstructed signal) are shown in Fig. 1.

Thereafter, the years which saw increased seismic activity during the winter periods were considered (Table 2). For these years AR models were constructed, however some of them failed to pass the diag-

Table 1. Model characteristics.

Year	Component length	Delay time	Forecasting error variance
2000	85	6	10.96
2001	52	6	6.57
2002	266	6	15.14
2004	222	6	2.89
1999	66	6	47.74
2005	111	6	27.06

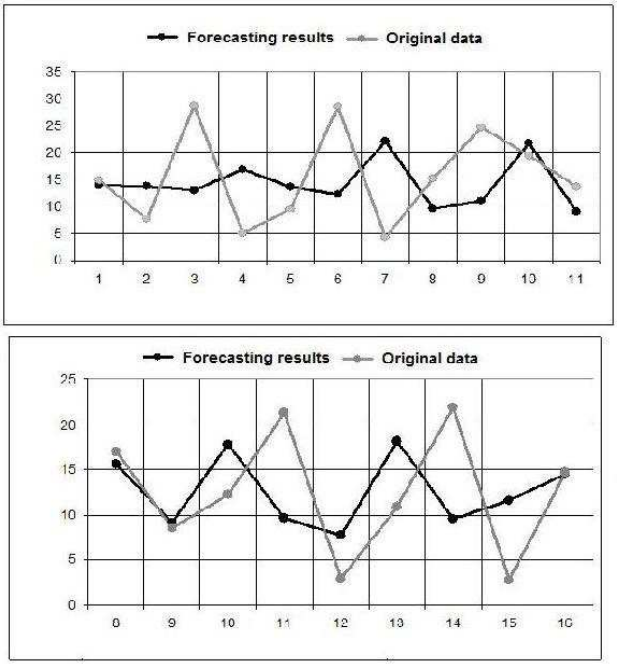


Fig. 2. Critical frequency signal forecasting for a seismically active winter period: top — 1999; bottom — 2005.

Table 2. Data from an earthquake log.

Year	Day	Earthquake energy
1999	11 January	12.9
2005	20 January	12.7

nostic test (1999 and 2005, Table 1). The forecasting results of f_{-n} components for these years are demonstrated in Fig. 2. The analysis of seismically active periods showed that signals contain abnormal effects which precede strong seismic events and which appear in the signal 5 to 15 days before the seismic activity.

Conclusions

We have introduced and discussed a novel method of multicomponent simulation, forecasting and intellectual analysis of a complex natural signal using a non-linear approximation scheme. By means of an example that deals with critical frequency data processing, we have demonstrated the effectiveness of this method. Its utility has been confirmed by the results of signal forecasting with the average step of 70 samples: something which cannot be achieved by conventional time series simulation methods. In addition, we have shown the connection between atmospheric processes and seismic phenomena.

References

[1] *Bogdanov V. V., Geppener V. V., Mandrikova O. V.* Simulation of non-stationary time series of geophysical parameters with complex structure. — Saint-Petersburg: LETI, 2006. — 107 p.

[2] *Mallat S.* A Wavelet tour of signal processing. — Prentice Hall, 2005. — 671 p.

[3] *Mandrikova O. V., Goreva T. S.* The method of identification of structural components of a complex natural signal on the basis of wavelet-packets // Digital Signal Processing. — 2010. — No. 1. — Pp. 45–50.

Комплекс программно-информационных средств оперативного дешифрирования космических изображений

Абламейко С. В., Крючков А. Н., Апарин Г. П., Сотикова Е. Е.
abl@newman.bas-net.by, aparin@newman.bas-net.by
Минск, Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси

Рассматривается программно-информационный комплекс оперативной обработки данных ДЗЗ, предназначенный для обеспечения различных потребителей спутниковой информацией, прошедшей обработку на разных уровнях (первичную, межотраслевую, целевую). Дается краткая характеристика программных блоков, реализующих технологии создания информационных продуктов по данным ДЗЗ.

Software and information system for operative decoding cosmic images

Ablameyko S. V., Kryuchkov A. N., Aparin G. P., Sotikova E. E.
United Institute of Informatics Problems, Minsk, Belarus

Software and information system for operative decoding cosmic images is described. It is intended for processing space images on different levels. Main program blocks and technologies of creating information products for various consumers are characterized briefly.

В настоящее время оперативное обновление цифровых карт местности эффективно реализуется на основе дешифрирования космических изображений. Для этого в мировой практике используются известные зарубежные программные пакеты, такие как ArcGIS, ArcView и MapInfo (США), ПАНОРАМА (Россия), SICAD/open (Германия), WinGIS (Австрия) и др. Однако использование зарубежных пакетов ограничено такими факторами как стоимость, закрытость форматов представления данных, невозможность их расширения и дополнения и др. Кроме того, как правило, системы государственного управления накладывают жесткие ограничения на защиту информации и сертификацию программных продуктов.

Рассматривается программно-информационный комплекс (ПИК) оперативного дешифрирования космических изображений, который разрабатывается в рамках Союзной программы «КОСМОС-НТ» и предназначен для наземного сегмента Белорусской космической системы дистанционного зондирования (НС БКСДЗ). ПИК разрабатывается на основе ГИС-технологий, методов цифровой обработки изображений, совместной обработки растровых и векторных моделей космических снимков и цифровых карт местности. Разрабатываемый комплекс предназначен в первую очередь для обработки данных ДЗЗ, которые должны поступать от Белорусского космического аппарата «БелКА», обеспечивающий панхроматическую съемку с разрешением 2,5 м и многозональную съемку (4 канала: 0,54–0,60; 0,63–0,69; 0,69–0,72; 0,75–0,86) с разрешением 10 м. По классификации космических снимков по разрешению [1] снимки, получаемые с белорусского КА относятся к снимкам с очень высоким разрешением, что обеспечивает среднемасштабное топографическое картографирования, детальное тематическое картографирование природных и социально-экономических объектов.

Разрабатываемый комплекс ориентирован на обработку данных ДЗЗ и от других спутников как с низким (NOAA), так и высоким (Worldview, Quickbird, Ресурс-ДК, Ikonos) разрешением. Программный комплекс входит в состав автоматизированной технологической системы тематического дешифрирования (АТС-ТД). Технологии, реализованные в ПИК, информационно взаимодействуют с тремя технологическими системами НС БКСДЗ: приема и регистрации информации; каталогизации, архивации, выдачи цифровых снимков и результатов их обработки потребителям; картографического обеспечения. ПИК (далее ПИК АТС-ТД) должен обеспечить потребителей информацией, прошедшей обработку на разных уровнях [2, 3] , в том числе: первичную обработку (устранение помех, восстановление структуры сигнала, радиометрическую и геометрическую коррекцию); межотраслевую обработку (создание цифровой или аналоговой топографической продукции в виде фотопланов, фотокарт, а также пространственных моделей местности); целевую и тематическую обработку. При этом используются методы совместной обработки растровых и векторных моделей земной поверхности. В качестве растровых используются цифровые снимки, фотодокументы, топографические карты. В качестве векторных используются объектно-ориентированные цифровые модели местности в рамках конкретного номенклатурного листа топографической карты, либо произвольного района.

Программные средства ПИК АТС-ТД

Технологии генерации выходных информационных продуктов реализуются программно-картографическим комплексом ПИК АТС-ТД. В состав

комплекса входят следующие основные компоненты: программные блоки, обеспечивающие предварительную, межотраслевую, целевую и тематическую обработку; управляющая система, включающая графическую оболочку, интерфейс пользователя, средства визуализации цифровых карт и снимков, а также средства доступа к оперативной базе данных; технологическая база данных. Подключение программных модулей конкретного программного блока осуществляется управляющей программой через систему основного и дополнительных «меню» в соответствии с заданной технологической последовательностью формирования необходимого информационного продукта.

Средства предварительной подготовки исходных данных

В данный блок входят задачи по определению потребности в цифровых картах местности (ЦКМ) определенного масштаба, либо цифровой карты на заданный район, в цифровой матрице рельефа (ЦМР), необходимых цифровых снимках (или снимка), служебной информации. Здесь формируется запрос к технологическим системам НС БКСДЗ и осуществляется помещение исходных цифровых данных в оперативную базу данных ПИК АТС-ТД. В этом же блоке формируется паспорт на создаваемый информационный продукт. Также сюда включена задача, которая сама по себе представляет отдельную технологию получения мозаичных изображений из разновременных перекрывающихся снимков. Эта задача включает ряд операций из блоков предварительной обработки, специальной обработки и блока привязки и трансформирования.

Средства привязки и трансформировани

Программные средства данного блока предназначены для решения задачи формирования математической модели пространственного преобразования изображений космических снимков (КС) и ЦКМ в системы координат друг друга. Задача решается путем определения параметров пространственного преобразования по известным координатам опорных точек. В качестве опорных точек используются четкие контуры местности, искусственные сооружения и другие элементы местности, хорошо опознающиеся на изображениях КС и ЦКМ. В состав программного блока входят следующие модули: модуль формирования массива опорных точек; модуль полиномиальных преобразований 1-3 порядка; модуль полиномиально-триангуляционных преобразований; модуль проективных преобразований; модуль анализа геометрических искажений изображения КС. В настоящее время реализован алгоритм выполнения последовательной комбинации методов полиномиальной аппроксимации и триангуляции [4].

Средства предварительной обработки цифровых снимков

Средства включают функции геометрических преобразований, коррекции изображений, подавление шумов. Геометрические преобразования включают функции: масштабирования, поворота, инверсии и зеркального отражения (горизонтального/вертикального) изображения. Модуль коррекции изображений включает функции компенсации линейных и нелинейных искажений. Для фильтрации и сглаживания маскирующего изображения КС низкочастотного шума используются стандартные методы цифровой обработки, основанные на операциях свертки с шумоподавляющими фильтрами, а также функции, нормирующие яркостно-контрастностные характеристики изображения. В данный блок включены: функции бинаризации (вычисления порога бинаризации методом Отсу, бинаризация по порогу, по среднему, по медиане); функции выделения краев с использованием операторов Собеля, Робертса, Превитта, Лапласа; функции сегментации изображения; функции фильтрации (минимальный, максимальный, усредняющий фильтры), фильтр с локальным альфа-усечением гистограмм.

Средства специальной обработки изображений

Средства включают функции: автоматической оценки качества изображений (классификация изображения по динамическому диапазону изменения яркостей и уровню шума; оценку величины облачности); исключения облачных образований; компенсации линейных искажений полутоновых изображений; обработки многозональных снимков; стереообработки изображения.

Средства тематического дешифрирования

Блок включает программные средства автоматической, полуавтоматической и интерактивной классификации объектов изображения, формирования тематических слоев выделенных классов объектов, включающие их метрическое и семантическое описание, а также функции по обработке изображений, необходимые при реализации задач поиска объектов. Эти функции включают: арифметические, логические операции, функции контрастирования, элементарные операции математической морфологии (вычисление эрозии, дилатации, отмыкания, замыкания, утоншения). Обработанное и нормализованное изображение снимка обрабатывается как автоматическими, полуавтоматическими, так и интерактивными методами классификации.

Автоматические методы реализуются на основе искусственных нейронных сетей и предназначены для автоматического выделения площадных объектов типа «леса», «озера» и «поля/луга», а также линейных протяженных объектов типа «дорога» разного класса, объекты гидрографии «реки», «каналы».

Полуавтоматические методы реализуются на основе сопоставления с эталонами и текстурного анализа. Данные методы реализуются путем поиска площадных объектов по подобию. В отличие от процедуры автоматического поиска площадных объектов, данный режим предусматривает возможность обеспечения пользователю задания в качестве эталона поиска некоторого объекта, выбранного пользователем, просмотра и модифицирования характеристики поиска, а также автоматического определения класса объекта, задаваемого пользователем в качестве эталона.

Интерактивное выделение площадных объектов реализуется методом автоматического выделения контуров объектов при указанной оператором одной или нескольких точек, принадлежащих объекту, автоматическое слияние областей или сегментов объектов с последующей векторизацией. По результатам обработки формируются тематические слои с заданным классом объектов в векторном формате, которые могут редактироваться средствами специального графического редактора, который входит в состав данного блока. Данный программный блок включает также средства формирования и редактирования базы эталонов объектов.

Средства формирования фотодокументов

Блок обеспечивает решение задач по формированию фотодокументов (фотосхем, фотокарт и фотопланов) на основе обработанных КС, цифровой картографической информации, результатов дешифрирования, а также элементов картографической графики (создание зарамочного оформления, легенд, аннотирование подписями и картографическими условными знаками). Аналогично, как и в блоке дешифрирования, для оперативного редактирования изображения фотодокумента используется специализированный картографический редактор, предназначенный для редактирования текстовой и векторной нагрузки фотодокумента.

Средства формирования тематических карт

Средства блока обеспечивают формирование тематических карт на основе ЦКМ и результатов тематического дешифрирования. Блок включает операции отбора объектов из ЦКМ, нанесение километровой и градусной сеток, формирование легенды, редактирование и использование элементов картографической и деловой графики.

Средства прямого обновления ЦКМ

Данный программный блок предназначен для решения задачи обнаружения изменений на местности и формирования цифровых массивов изменений в автоматическом и полуавтоматическом режимах на основе сопоставления результатов дешифрирования изображений КС с ЦКМ, с последующей автоматической актуализацией ЦКМ путем внесения в них выявленных изменений [5]. Обновленная ЦКМ проверяется средствами контроля, редактируется, если это необходимо, и помещается в базу данных НС БКСДЗ.

Средства геоинформационной поддержки технологий создания информационных продуктов

Включает практически все основные операции, присущие геоинформационным системам в части пространственного анализа, измерительных операций, анализа поверхностей, преобразование систем координат и проекций, работа со слоями картографической и тематической информации и другие. В данный блок включены также функции экспорта/импорта файлов в наиболее известные форматы ГИС (SXF, DXF, MID/MIF и другие). Все технологии по обработке и созданию информационных продуктов, реализуемые посредством функций программных блоков, опираются на технологическую базу данных, которая включает базы эталонов; классификаторов объектов местности; условных знаков и шрифтов, дешифровочных признаков и некоторые другие.

Выводы

Рассмотренный программный комплекс позволяет организовать эффективную обработку данных ДЗЗ на разных уровнях и обеспечить пользователей информационными продуктами, как в цифровом, так и аналоговом виде. Информационная и программная совместимость компонент комплекса, модульные принципы их построения позволяют обеспечивать наращивание функциональных возможностей без существенной переделки программных блоков.

Литература

[1] *Кравцова В. И.* Снимки сверхвысокого разрешения — новый компонент фонда цифровых космических снимков // Геодезия и картография. — 2004, №7, — С. 17–26.

[2] *Абламейко С. В., Апарин Г. П., Крючков А. Н.* Географические информационные системы. Создание цифровых карт — Минск: Ин-т техн. кибернетики НАН Беларуси, 2000. — 276 с.

[3] *Киенко Ю. П., Горелов В. А.* Об использовании цифровой космической информации для целей картографирования // Геодезия и картография. — 2002, №1, — С. 5–11.

[4] *Абламейко С. В., Боричев С. П., Крючков А. Н.* Комбинированный метод оперативной координатной привязки аэрокосмических снимков и цифровых моделей карт // Сб. Анализ изображений, Вып. 1, — 2002, — С. 122–130.

[5] *Крючков А. Н., Боричев С. П.* Метод оперативного выделения объектов местности на основе данных дистанционного зондирования и цифровых моделей карт // 1-й Белорусский космический конгресс, Минск, 28–30 октября 2003 г. Материалы конгресса — 2003, — С. 175–177.

Комплекс и технологии тематической обработки данных дистанционного зондирования Земли

Абламейко С. В., Крючков А. Н., Апарин Г. П., Соболь Л. Н.
abl@newman.bas-net.by, aparin@newman.bas-net.by
Минск, Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси

Рассматривается комплекс тематической обработки данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ), предназначенный для обеспечения различных потребителей спутниковой информацией, прошедшей обработку на разных уровнях (первичную, межотраслевую, целевую). Дается характеристика технологий создания информационных продуктов по данным ДЗЗ и цифровым картам местности (ЦКМ).

System and technologies for thematic processing remote sensing data

Ablameyko S. V., Kryuchkov A. N., Aparin G. P., Sobol L. N.
United Institute of Informatics Problems, Minsk, Belarus

System and technologies for thematic processing remote sensing data for various consumers are described. They are intended for processing space images on different levels. Technologies of creating information products using remote sensing data and digital maps are characterized briefly.

Дистанционное зондирование и геоинформационные системы (ГИС) утвердились как ключевые технологии в управлении природными ресурсами и жизнеобеспечением.

Бурное развитие космических систем дистанционного зондирования позволяет получать оперативные и актуальные данные о местности на любой регион планеты. Многообразие обрабатываемых данных, выходных продуктов и методов получения информационных продуктов ставит задачу создания сквозных технологий обработки данных ДЗЗ на основе автоматических и полуавтоматических методов дешифрирования снимков с использованием геоинформационных технологий создания продукции в цифровом и графическом виде [1]. В мировой практике для этих целей используются в различной комбинации известные зарубежные достаточно дорогие программные пакеты, такие как ArcGIS, ArcView и MapInfo (США), ПАНОРАМА (Россия), SICAD/open (Германия), WinGIS (Австрия) и др.

В данной работе рассматриваются технологии создания информационных продуктов, реализованные в комплексе тематической обработки (КТО) данных ДЗЗ. Комплекс разрабатывается в рамках Союзной программы России и Беларуси «Космос-НТ» и предназначен в первую очередь для наземного сегмента Белорусской космической системы дистанционного зондирования (НС БКСДЗ).

Комплекс тематической обработки состоит из трех технологически и информационно взаимосвязанных технологических систем:

— первичной обработки данных (ЦФС-ЛМ);
— картографического обеспечения (АТС-КО);
— тематического дешифрирования (АТС-ТД).

Назначение системы первичной обработки — это, во-первых, формирование данных и ориентация цифровых изображений (ЦИ), полученных целевой аппаратурой (ЦА) аппарата «БелКА», и, во-вторых, фотограмметрическая обработка цифровых снимков (ЦС) с целью получения цифровой модели рельефа (ЦМР). АТС-КО предназначена для оперативного создания ЦКМ, обновления ЦКМ по результатам обработки ЦС, подготовки цифровой информации о местности на территорию произвольной конфигурации и формирования ЦМР. АТС-ТД предназначена для оперативной обработки ЦС.

Технологии, реализованные в КТО, информационно взаимодействуют с двумя технологическими системами НС БКСДЗ: приема и регистрации информации и каталогизации, архивации, выдачи цифровых снимков и результатов их обработки потребителям. КТО должен обеспечить потребителей информацией, прошедшей обработку на разных уровнях [2], в том числе: первичную обработку (устранение помех, восстановление структуры сигнала, радиометрическую и геометрическую коррекцию); межотраслевую обработку (создание цифровой или аналоговой топографической продукции в виде фотопланов, фотокарт, а также пространственных моделей местности); целевую и тематическую обработку [3].

Под информационным продуктом будем понимать выходную продукцию в цифровом или аналоговом виде, полученную на основе данных ДЗЗ и цифровых карт местности (ЦКМ) на одном или нескольких уровнях обработки. Информационными продуктами КТО являются:

— ЦС, прошедшие предварительную обработку (устранение помех, геометрическую коррекцию и трансформирование и др.);
— ЦКМ, обновленные по результатам дешифрирования ЦС;

Международная конференция «Интеллектуализация обработки информации» (ИОИ-8), Кипр, г. Пафос, 17–24 октября 2010 г.
International conference "Intelligent Information Processing" IIP-8, Cyprus, Paphos, October 17–24, 2010.

— цифровые фотодокументы (фотосхемы, фотокарты);
— тематические карты, полученные на основе ЦКМ и результатов дешифрирования, либо тематической обработки;
— цифровые мозаичные изображения, полученные из ряда разновременных перекрывающихся снимков;
— ЦМР, полученные в результате стереообработки цифровых снимков.

При этом используются методы совместной обработки растровых и векторных моделей земной поверхности [4]. В качестве растровых используются цифровые снимки, фотодокументы, топографические карты. В качестве векторных используются объектно-ориентированные цифровые модели местности в рамках конкретного номенклатурного листа топографической карты, либо произвольного района.

Технологии создания информационных продуктов

В зависимости от вида получаемой выходной продукции в КТО выделено четыре технологических маршрута обработки данных ДЗЗ и ЦКМ:

— ТМ1 — технологический маршрут получения ЦС заданного уровня обработки;
— ТМ2 — технологический маршрут получения фотодокументов (фотосхем, фотопланов и фотокарт);
— ТМ3 — технологический маршрут получения тематических карт по результатам тематической обработки ЦС;
— ТМ4 — технологический маршрут прямого обновления ЦКМ по данным ДЗЗ.

Технологический маршрут ТМ1

Технология получения ЦС заданного уровня обработки реализуется с помощью двух технологических систем, входящих в состав КТО: системы первичной обработки ЦФС-ЛМ (разработка ОАО «Пеленг») и системы тематического дешифрирования АТС-ТД (разработка ОИПИ НАН Беларуси). С учетом особенностей процесса съемки земной поверхности ЦА и методов обработки данных предусмотрено формирование различных видов цифровых изображений, которые можно разделить на следующие уровни обработки:

— уровень «A» — обзорные и детальные изображения выбранных участков маршрута съемки в виде единой и согласованной мозаики микрокадров — мозаики цифрового изображения. Каждому фрагменту общей мозаики соответствует микрокадр цифрового изображения, полученный отдельной матрицей фотоприемников с учетом времени его создания и пространственного положения с исключением поперечных и продольных перекрытий;
— уровень «B» — геопривязанные цифровые изображения в одной из выбранных систем координат, при формировании которых путем геометрической коррекции цифровых данных учтены основные параметры ЦА, орбиты и положения КА, параметров Земли, кроме поправок за рельеф местности;
— уровень «C» — ортофотоизображения в заданной картографической проекции, в которых путем геометрической коррекции цифровых данных учтены все основные параметры ЦА, КА и Земли;
— уровень «D» — цифровые изображения, полученные путем формирования блока мозаики из перекрывающихся разновременных снимков, обработанных до уровня «C».

Полученные изображения заданного уровня обработки помещаются в базу данных с соответствующим паспортом снимка.

Технологический маршрут ТМ2

Технологический маршрут предназначен для получения цифровых фотосхем, фотопланов и фотокарт по материалам аэрокосмической съемки. При этом могут использоваться как стереоскопические, так и одиночные снимки.

Технология включает следующие основные операции:

— получение необходимой информации из базы данных;
— предварительная обработка снимков;
— привязка и ортотрансформирование снимков;
— формирование мозаики изображения;
— дешифрирование ЦС (при необходимости);
— формирование картографической нагрузки и оформление фотодокумента;
— помещение цифрового фотодокумента в базу данных.

Операция предварительной обработки включает стандартные функции улучшения изображения.

Привязка и ортотрансформирование снимков обеспечивает привязку ЦС и ЦКМ и преобразование систем координат с учетом поправок на рельеф. Элементы внешнего ориентирования снимков для ортотрансформирования берутся из результатов фотограмметрической обработки снимков на ЦФС-ЛМ. Информация о рельефе для ортотрансформирования может быть получена также по уже имеющимся цифровым картам местности. На основе элементов внешнего ориентирования снимков и информации о рельефе выполняется ортотрансформирование ЦС. Эта процедура выполняется для каждого снимка, покрывающего требуемый номенклатурный лист или район работ с заданными границами.

На следующем этапе фрагменты трансформированных изображений «сшиваются» в единое изображение — фотоплан. При «сшивке» соседних фрагментов выполняется автоматическое выравнивание изображения.

При необходимости может быть выполнена операция интерактивного дешифрирования ЦС с целью выделения интересующих объектов и помещения их на фотодокумент.

Для получения цифровой фотокарты на фотоплан переносится часть векторной информации из ЦКМ.

Технология включает также формирование зарамочного оформления и легенды фотодокумента. Полученный цифровой фотодокумент помещается в базу данных. Также фотодокумент может быть выведен на устройства документирования.

Технологический маршрут ТМ3

Технология предусматривает получение тематических карт на основе ЦКМ и данных дешифрирования ЦС. Технология включает следующие операции:

- запрос и получение из базы данных необходимой информации;
- предварительной обработки ЦС;
- привязка и трансформирование ЦС;
- дешифрирование ЦС;
- формирование тематической карты;
- контроль и редактирование тематической карты;
- помещение цифровой тематической карты в базу данных.

Операции предварительной обработки ЦС, привязки, трансформирования и дешифрирования аналогичны операциям при формировании фотодокументов.

Формирование тематической карты включает наложение тематической информации на картографическую векторную основу, отбор заданных картографических объектов для тематической карты, выбор типов шрифтов, символизацию объектов карты принятыми условными знаками, создание зарамочного оформления в правилах картиздания и легенды карты.

Далее технологией предусмотрено картографическое издательское редактирование тематической карты с последующей подготовкой карты к выводу на устройство документирования. В целом технология включает все операции автоматизированной подготовки карт к изданию.

Технологический маршрут ТМ4

Обновление ЦКМ выполняется по одиночным аэро- и космическим снимкам и фотопланам, составленных по материалам аэро- и космической съемки в технологическом маршруте ТМ2, либо полученных с других ЦФС в формате BMP или TIFF. В процессе обновления контурной части содержание карты приводится в соответствие со снимком, устраняются обнаруженные ошибки в изображении форм рельефа (если рельеф был получен на ЦФС). В процессе обновления из ЦКМ исключаются отсутствующие на снимке объекты, включаются вновь появившиеся объекты, корректируется форма или семантика существующих объектов. Технология прямого обновления ЦКМ включает следующие операции:

- запрос и получение из базы данных исходных материалов (ЦС, ЦКМ, ЦМР);
- предварительная обработка ЦС;
- привязка ЦС к ЦКМ;
- автоматическое и интерактивное дешифрирование объектов ЦС;
- формирование массива изменений;
- трансформирование результатов дешифрирования;
- автоматизированное внесение изменений в ЦКМ;
- контроль и редактирование обновленной ЦКМ;
- помещение ЦКМ в базу данных.

Запрос в базу данных обеспечивает получение ЦКМ, цифровых снимков, покрывающих обновляемую ЦКМ, ЦМР, необходимую для трансформирования ЦС к ЦКМ. Для обновления может быть использован цифровой фотоплан, если он был получен средствами технологического маршрута ТМ2. В случае отсутствия в базе данных ЦМР, она может быть построена с заданным шагом сетки по имеющимся в ЦКМ горизонталям, отметкам высот и урезам воды. Предварительная обработка снимка включает функции по обработке ЦС, необходимые для улучшения изображения с целью дальнейшего дешифрирования снимков. Сюда входят функции контрастирования, коррекции, подавления шумов и другие.

Операция привязки ЦС и ЦКМ предназначена для формирования математической модели пространственного преобразования изображений ЦС и ЦКМ в системы координат друг друга. Задача решается путем определения параметров пространственного преобразования по известным координатам опорных точек. В дальнейшем параметры пространственных преобразований используются в блоке трансформирования векторной модели объектов обновления.

Операция выделения изменения местности выполняется с использованием средств автоматической и интерактивной классификации объектов ЦС с использованием ЦКМ и базы эталонов. По результатам обработки формируются объекты заданного класса в векторном формате, который может сразу же редактироваться средствами специально-

го графического редактора. Получение цифровой информации о рельефе выполняется средствами ЦФС-ЛМ. Полученный массив изменений трансформируется в систему координат ЦКМ и передается в картографический блок для обновления ЦКМ. После внесения изменений в ЦКМ, выполняется контроль обновленной ЦКМ (метрического описания, семантики, правильность приписания высот) и ее редактирование с помощью картографического редактора. После редакторских работ ЦКМ помещается в базу данных.

Выводы

Рассмотренный программный комплекс и технологии позволяют организовать эффективную обработку данных ДЗЗ на разных уровнях и обеспечить пользователей информационными продуктами, как в цифровом, так и аналоговом виде. Информационная и программная совместимость компонент комплекса, модульные принципы их построения позволяют обеспечивать наращивание функциональных возможностей без существенной переделки программных блоков.

Литература

[1] *Абламейко С. В., Апарин Г. П., Крючков А. Н.* Географические информационные системы. Создание цифровых карт — Минск: Ин-т техн. кибернетики НАН Беларуси, 2000. — 276 с.

[2] *Киенко Ю. П., Горелов В. А.* Об использовании цифровой космической информации для целей картографирования // Геодезия и картография. — 2002, №1. — С. 5–11.

[3] *Ablameyko S. V., Kruchkov A. N., Zolotoy S. A.* Technologies for Interpretation of Remote Sensing Images and Digital Maps and Their Usage for Applied Tasks // Proc. of the Second Intern. Conf. “Problems of Cybernetics and informatics”, 10–12 Sep. 2008, Baku, — Pp. 159–162.

[4] *Крючков А. Н., Соболь Л. Н., Сотикова Е. Е., Апарин Г. П.* Инструментальные средства оперативного дешифрирования космических изображений // Сб. материалов V Международной научно-технической конференции «Проблемы проектирования и производства радиоэлектронных средств»: В 3-х томах. Том III. — Новополоцк: ПГУ, 2008. — С. 176–179.

Восстановление количественных характеристик природно-техногенных объектов по результатам попиксельной обработки авиационных гиперспектральных изображений*

Кондранин Т. В., Козодеров В. В., Дмитриев Е. В., Бобылев В. И.
kondr@kondr.rector.mipt.ru
Московская обл., г. Долгопрудный, Московский физико-технический институт (государственный университет)

В данной работе представлены теоретические и прикладные аспекты тематической обработки данных отечественной гиперспектральной аппаратуры, разработанной в НПО Лептон. Описываются подходы, применяемые на этапах первичной обработки данных, классификации растительности и восстановления соответствующих количественных характеристик, таких как биомасса и продукция углерода. Полученные результаты демонстрируются на основе данных самолетных измерительных кампаний.

Quantitative vegetation parameters retrieval using the results of pixel-by-pixel processing of airborne hyperspectral imagery*

Kondranin T. V, Kozoderov V. V., Dmitriev E. V., Bobylev V. I.
Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Dolgoprudny, Russia

The theoretical and applied aspects of the thematic processing of hyperspectral imagery are represented in this paper. The data used were obtained from the high resolution radiometer developed by NPO Lepton. The methods used at the stage of the primary data processing, the object recognition and the vegetation parameters retrieval are described. The results obtained are demonstrated on the basis of data of airborne measurement campaign.

Существующие системы дистанционной оценки состояния и автоматизированной инвентаризации природных ресурсов основаны на использовании мультиспектральных космических изображений и позволяют получать лишь весьма ограниченную информацию о природных объектах. Стандартные системы мониторинга почвенно-растительного покрова используют до семи спектральных каналов видимого и ближнего инфракрасного диапазонов. Алгоритмы, используемые для распознавания типа и оценки параметров растительного покрова, основаны на упрощенной концепции «вегетационных индексов» [1]. При таком подходе удается охарактеризовать состояние природных объектов лишь на качественном уровне. Наиболее перспективными направлениями дальнейшего развития являются разработка аппаратуры высокого спектрального разрешения и создание методов тематической обработки и интерпретации соответствующих данных измерений — гиперспектральных аэрокосмических изображений. Обзор методов распознавания объектов с использованием данных гиперспектральной съемки приведен в работе [2].

Современный уровень систем дистанционного мониторинга природных объектов предполагает наличие как высокоточной аппаратной части для измерения спектральной яркости отраженного и собственного излучения, так и разнообразного алгоритмического и программного обеспечения для коррекции и тематической обработки получаемых данных. Рассматриваемые задачи классификации и оценки биопродукционных параметров растительности относятся к классу некорректных обратных задач переноса излучения в системе «земная поверхность — атмосфера». Для их решения требуется применение различных методов регуляризации. Дополнительные сложности решения такого рода задач определяются необходимостью согласования времени сканирования, спектральных характеристик используемых фильтров, квантовой эффективности приемника, особенностей оптической системы регистрации данных и условий солнечного освещения объектов [3].

Используемые данные

Интенсивное мировое развитие и реальный ввод в эксплуатацию гиперспектральных аэрокосмических радиометров началось еще в 80-х годах. Одной из первых таких систем была аппаратура «Самолетный видеоспектрометр видимой и инфракрасной области» (Airborne Visible and Infrared Imaging Spectrometer/AVIRIS), разработанная в Национальном управлении США по космосу (НАСА) [4]. Аппаратура AVIRIS позволяет получать изображения синхронно в 224 спектральных каналов в области длин волн 400–2500 нм с шириной каждого канала в 10 нм и выше.

Известны самолетные гиперспектрометры, ориентированные на высокое спектральное разрешение видимого диапазона. В частности, Канадская аппаратура CASI (Compact Airborne Spectrographic Imager) содержит 288 спектральных каналов в об-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №08-07-00284-а, №09-05-00171-а, ФЦП НК-568П и в рамках проекта по аналитической ведомственной целевой программе «Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2010 годы)» на 2010 год.

ласти спектра 430–870 нм. Существует также гиперспектральная аппаратура, работающая на космических платформах. В настоящее время хорошо известна «Аппаратура гиперспектральных изображений» (Hyperspectral Imager/Hyperion), которая содержит 220 спектральных каналов в области длин волн от 400 до 2500 нм и позволяет получать гиперспектральные изображения с пространственным разрешением около 30 м.

Несмотря на то, что в России в этой области имеет место некоторое отставание, на сегодняшний день существуют возможности использования отечественных приборов мирового уровня. В наших исследованиях были использованы данные самолетного гиперспектрального радиометра, разработанного сотрудниками НПО Лептон. Прибор имеет 270 спектральных каналов в диапазоне от 400 до 1000 нм. Спектральное разрешение в видимом диапазоне составляет от 0,5 до 5 нм, а в ближнем инфракрасном порядка 10 нм. Прибор был откалиброван для измерения абсолютных величин энергетических яркостей с использованием диффузно-излучающей сферы, откалиброванной во ВНИИОФИ. Дополнительно проведено сравнение с высокоточным американским спектрорадиометром ASD FieldSpec 3 VNIR.

Первичная обработка

При проведении измерительных кампаний возникают условия, приводящие к искажению как спектральной, так и пространственной составляющих гиперспектральных изображений. Перед использованием калиброванных данных, необходимо контролировать и по возможности компенсировать возможные радиационные и радиометрические помехи. При имеющемся высоком спектральном разрешении, радиационные искажения могут быть выявлены сопоставлением резких минимумов спектральных кривых со значениями наиболее интенсивных линий поглощения атмосферных газов, таких, как линия кислорода (761,2 нм) или линия CH (430,6 нм). Для проведения такого сравнения мы использовали данные моделирования MODTRAN `http://www.modtran.org`.

В некоторых спектральных каналах были обнаружены радиометрические помехи — линии вдоль трека, возникающие вследствие систематических ошибок измерения яркости в отдельных элементах ПЗС-матрицы. Интенсивность такого рода искажений относительно небольшая, однако этого оказалось вполне достаточно, для того чтобы внести существенные искажения при распознавании слабо различающихся объектов. Для устранения такого рода помех использовалась статистическая коррекция — выделение однородного объекта вдоль полосы захвата и последующее осреднение. Корректирующие коэффициенты оказались неодинаковыми для различных спектральных каналов.

Для обучения и валидации алгоритмов классификации и восстановления биопродукционных характеристик растительного покрова было необходимо осуществить привязку гиперспектральных изображений к наземным данным, представленным как в табличном виде, так и в виде специализированных карт. Для этого были использованы синхронные фотоснимки и RGB-проекции гиперспектральных данных.

Методика обработки данных гиперспектрального зондирования

Тематическая обработка гиперспектральных изображений состоит из двух этапов: распознавания объектов природно-техногенной сферы и восстановления количественных значений параметров почвенно-растительного покрова. При решении задачи распознавания нами разделяется два принципиально разных подхода: распознавание на основе спектральной информации каждого отдельного пикселя и распознавание на основе анализа пространственных градаций яркости изображений в фиксированном канале радиометра. На данном этапе классификация по спектральным признакам представляется более перспективной.

Используемый алгоритм распознавания природных и антропогенных объектов по данным гиперспектрометра основан на методах дискриминантного анализа [5]. Суть данного подхода заключается в том, чтобы построить оптимальную «дискриминантную» функцию в n-мерном пространстве признаков, в данном случае нормированных спектральных яркостей, обеспечивающую на конечном обучающем множестве минимальную среднеквадратическую ошибку классификации, либо минимальную полную вероятность ошибки. Очевидно, что поиск в пространстве всех возможных функций обречен на неудачу, поскольку всегда и бесконечным числом способов можно «идеально» разделить имеющийся конечный ансамбль измерений. Поэтому, для построения дискриминантной функции используют представления в виде того или иного конечномерного базиса. Наиболее часто дискриминантная функция представляется в виде многочлена n-й степени. Учитывая количество имеющихся данных, мы ограничились рассмотрением линейных и квадратичных функций.

Основу традиционных подходов к оценке состояния растительного покрова по данным дистанционного зондирования составляет расчет так называемых «вегетационных индексов» — параметров, представляющих собой абсолютные либо относительные значения комбинаций яркостей, регистрируемых в различных спектральных каналах. На сегодняшний день стала очевидной ограничен-

ность данного упрощенного подхода. В частности, в работе [6] было показано, что при использовании данных LANDSAT/ETM+, оценка состояния растительного покрова на основе индекса NDVI (Normalized Difference Vegetation Index) имеет существенные ограничения вследствие того, что разным значениям объема фитомассы растительности, восстанавливаемым на основе рассматриваемого здесь подхода, могут соответствовать одинаковые значения данного индекса.

Мы придерживаемся постановки задачи восстановления биопродукционных параметров растительного покрова, как обратной задачи переноса излучения в системе «земная поверхность — атмосфера» [3, 7]. В этом случае реализуется возможность объединения данных моделирования и мониторинга. Ранее нами было разработано программное обеспечение, позволяющее восстанавливать биологические и продукционные характеристики растительного покрова по многоспектральным изображениям [8]. Программное обеспечение было адаптировано для обработки гиперспектральных данных. Процедуры реализуются на основе решения прямой и обратной задачи формирования интенсивности уходящего излучения, регистрируемого гиперспектрометром. Основными восстанавливаемыми параметрами, входящими в прямую задачу являются: тип леса, тип межкроновой растительности, сомкнутость лесного полога и ажурность крон.

После того, как найдено регуляризованное решение обратной задачи, рассчитываются производные параметры, такие, как объем зеленой фитомассы растительности, доля поглощенной фотосинтетически активной радиации (ДПФАР), чистая первичная продукция (ЧПП) — масса углерода, поглощенного растениями из атмосферы на единичной площади в единичный период времени за вычетом дыхания растений. Расчет производных параметров производится на основе эмпирических соотношений (параметризаций), полученных с помощью данных наземных измерений. В частности при расчете ЧПП используются параметризации, построенные по данным Московского государственного университета леса. Параметризации адаптированы к растительности Восточно-европейской части России.

Мы использовали упрощенную модель, когда лесная древесная растительность представляется двумя основными классами — хвойные и лиственные деревья. Конечная формула расчета ЧПП (Y) имеет вид:

$$Y = (1 - W)\left(\frac{X}{B_{\text{decid}}}\right)^{A_{\text{decid}}} + W\left(\frac{X}{B_{\text{conif}}}\right)^{A_{\text{conif}}},$$

где X — биомасса листьев, A и B — эмпирические параметры, соответствующие заданному типу леса (decid — лиственные породы, conif — хвойные), W — весовой коэффициент, который характеризует вклад хвойных деревьев в общее значение ЧПП.

Численные эксперименты

Изложенная выше методика применялась для тематической обработки данных гиперспектральной съемки выделов лесных хозяйств Тверской области, полученных в августе 2009 года. Рассматриваемый в данной работе тестовый участок расположен к юго-востоку от г. Тверь и охватывает значительную часть территории Савватьевского лесничества при впадении р. Орша в р. Волга. Представленные в регионе условия рельефа, растительные ассоциации, водные и антропогенные объекты достаточно разнообразны. Их геоботаническое описание приведено в работе [9]. По данному региону проводятся регулярные лесотаксационные обследования. Определяются породный состав леса, возраст, бонитет, высота деревьев, плотность полога и тип межкроновой растительности. Для иллюстрируемого ниже трека самолетных гиперспектральных измерений основную породу составляют сосняки возраста от 70 до 120 лет. Траектории полетов выбирались таким образом, чтобы максимально эффективно использовать имеющиеся наземные измерения для осуществления процессов обучения классификаторов и валидации.

При решении задачи распознавания использовались линейный и квадратичный дискриминантный анализ. Для оценки дискриминантных функций были выбраны достаточно большие ансамбли спектров энергетической яркости (от 1500 до 9000 реализаций), соответствующие открытой водной поверхности, различным типам почв, луговой и породного состава леса. Для разделения обучающих выборок спектров внутри фиксированного класса и возможного за счет этого повышения точности решающих правил используются методы кластерного анализа. Численные эксперименты показали, что для разделения водных объектов, почвогрунтов и растительности достаточно применения методов линейного дискриминантного анализа. Приемлемым образом различается лесная и луговая растительность. В то же время распознавание различных типов породного состава леса требует более сложных решающих правил. В этом случае оправдано применение квадратичного дискриминантного анализа.

Результаты решения обратной задачи восстановления параметров представлены на рис. 1. Распределение восстановленных значений биомассы листвы/хвои соответствует ожидаемым значениям — наименьшая биомасса заметна для территорий редколесья и выделов с преобладанием березы или ольхи. По сравнению с традиционным отображением состояния растительного покрова с помо-

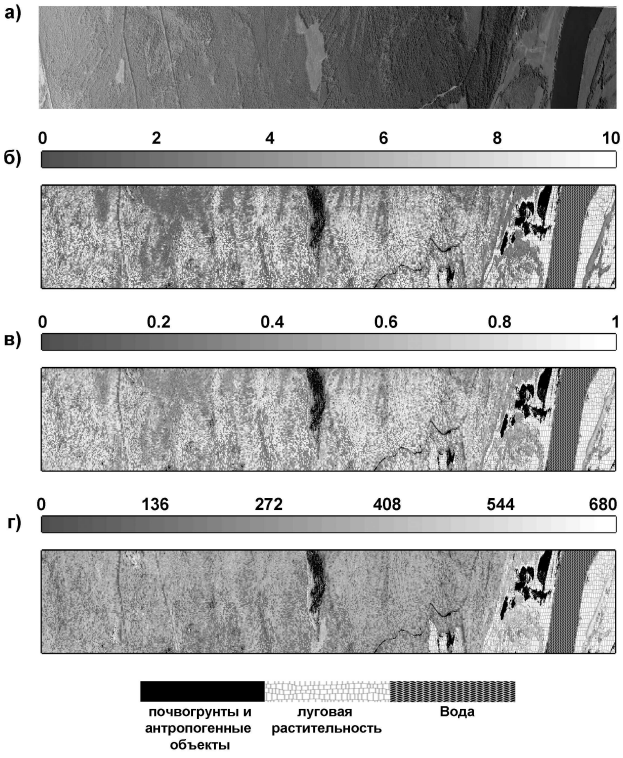


Рис. 1. Результаты восстановления количественных характеристик лесной растительности: а) аэрофотоизображение, б) биомасса листвы/хвои, т/га, в) доля поглощенной фотосинтетически активной радиации, г) чистая первичная продукция углерода, г/м^2/год.

щью NDVI представленные данные демонстрируют более высокое соответствие реальным данным наземных наблюдений, что согласуется с аналогичными результатами обработки многоспектральных космических изображений высокого пространственного разрешения [6]. Данные NDVI дают возможность различения лишь малой части объектов (растительность в «хорошем состоянии», растительность в «плохом состоянии», открытая почва, вода, бетон). Предлагаемая новая информационная продукция дает представление о тонкой структуре объектов почвенно-растительного покрова в терминах объема фитомассы растительности.

Следствием реализации предлагаемого подхода являются новые возможности оценки биологической продуктивности различных экосистем. На рис. 1в-г представлены примеры отображения характеристик поглощения фотосинтетически активной радиации и продукции углерода для выбранной территории. Точность восстановления ДПФАР и ЧПП полностью определяется используемыми параметризациями и не может быть проконтролирована по данным лесотаксации.

Выводы

Предложена методика тематической обработки гиперспектральных изображений, которая включает этапы предварительной коррекции данных, распознавания объектов природно-техногенной сферы и восстановления количественных биопродукционных параметров растительного покрова. Общая цель работы состоит в развитии алгоритмического и программного обеспечения, ориентированного на обработку данных гиперспектрального авиакосмического зондирования. Полученные результаты показали более широкие возможности предлагаемых методов по сравнению с традиционными методами, основанными на концепции вегетационных индексов.

Литература

[1] *Price S. D., Justice C. O.* Coarse resolution remote sensing of the Sahelian environment // International Journal of Remote Sensing. — 1991. — V. 12, № 6. — P. 1137–1146.

[2] *Jain A. K., Duin R. P. W., Mao J.* Statistical Pattern Recognition: A Review. // IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence. — 2000/ — V. 22, № 1. — P. 4–37.

[3] *Козодеров В. В., Кондранин Т. В.* Методы оценки состояния почвенно-растительного покрова по данным оптических систем дистанционного аэрокосмического зондирования. — Москва, МФТИ, 2008. — 222 с.

[4] *Vane G., Goetz A. F. H.* Terrestrial imaging spectroscopy // Remote Sens. Environ. — 1988. — V. 24.— P. 1–29.

[5] *Ким Дж. О., Мьюллер Ч. У., Клекка У. Р., Олдендерфер М. С., Блашфилд Р. К.* Факторный, дискриминантный и кластерный анализ. По ред. И. С. Енюкова. — Москва, Финансы и статистика, 1989. — 215 с.

[6] *Kozoderov V. V., Dmitriev E. V.* Remote sensing of soils and vegetation: regional aspects // International Journal of Remote Sensing. — 2008. — V. 29, № 9. — P. 2733–2748.

[7] *Козодеров В. В., Кондранин Т. В., Косолапов В. С., Головко В. А., Дмитриев Е. В.* Восстановление биомассы и других параметров состояния почвенно-растительного покрова по результатам обработки многоспектральных спутниковых изображений // Исследование Земли из космоса. — 2007. — № 1. — С. 57–65.

[8] *Козодеров В. В., Кондранин Т. В., Дмитриев Е. В., Егоров В. Д., Борзяк В. В.* Инновационная технология обработки многоспектральных космических изображений земной поверхности // Исследование Земли из космоса. — 2008. — № 1. — С. 56–72.

[9] *Козодеров В. В., Кондранин Т. В., Казанцев О. Ю., Бобылев В. И., Щербаков М. В., Борзяк В. В., Дмитриев Е. В., Егоров В. Д., Каменцев В. П., Беляков А. Ю., Логинов С. Б.* Обработка и интерпретация данных гиперспектральных аэрокосмических измерений для дистанционной диагностики природно-техногенных объектов // Исследование Земли из космоса. — 2009. — № 2. — С. 36–54.

Автоматический способ вычисления индекса геомагнитной активности K на основе вейвлет-пакетов*

Мандрикова О. В., Соловьев И. С.
oksanam1@mail.kamchatka.ru, kamigsol@yandex.ru
г. Петропавловск-Камчатский, Камчатский государственный технический университет,
Институт космофизических исследований и распространения радиоволн ДВО РАН

В работе предложен автоматический метод вычисления индекса геомагнитной активности K на основе вейвлет-пакетов. Заложенный в основу метода численный алгоритм по методике соответствует ручному способу, предложенному Дж. Бартельсом. Эффективность метода доказана экспериментально.

Automatic method of the Geomagnetic Activity Index K calculation on the basis of wavelet-packets*

Mandrikova O. V., Solovyev I. S.
Kamchatka State Technical University, Institute of Cosmophysical Researches and Radio Wave Propagation,
Petropavlovsk-Kamchatskii, Russia

In the present paper an automatic method of the Geomagnetic Activity Index K calculation is proposed. This method is based on wavelet-packets and corresponds to the manual mode. The effectiveness of the method has been proven by numerous experiments on real data.

Изучение характера вариаций магнитного поля Земли является актуальной задачей и служит основой оценки свойств и состояния электромагнитных полей в околоземном пространстве [1, 2]. Вследствие воздействия солнечного ветра на магнитосферу Земли изменяются параметры магнитного и электрического полей, возбуждаются разного рода волны. Эти величины необходимы для оценки силы магнитной бури, характеризующей воздействие Солнца и солнечной активности на околоземное пространство. В качестве меры магнитной возмущенности используется индекс геомагнитной активности K (K-индекс). Он был введен Бартельсом в 1938 г. [1] и определяет меру магнитной возмущенности за 3-х часовой интервал времени по 9-бальной квазилогарифмической шкале, которая индивидуальна для каждой станции наблюдения. K-индекс вычисляется из магнитограмм (используются горизонтальные составляющие магнитного поля — H компоненты) по специальной методике, которая предполагает высокий уровень профессиональной подготовки персонала магнитной обсерватории. Основные требования данной методики предъявляются к выделению невозмущенной вариации геомагнитного поля, которая называется Sq-кривой. Автоматизация процесса вычисления K-индекса позволит более эффективно решать задачи обработки и исследования магнитных данных, обеспечит автоматический анализ регистрируемых сигналов. В настоящее время расширяется сеть станций регистрации сигналов, накапливаются большие массивы данных, и эта задача является весьма актуальной: «есть нерешенные методологические вопросы определения K-индекса, особенно для нулевых дней» [2].

На рис. 1. показаны спокойная и возмущенная составляющие магнитного поля (H компоненты). Как видно из рис. 1, в моменты магнитной бури в сигналах наблюдаются резкие выбросы и пульсации разных периодов, которые могут длиться несколько часов. Из-за сильной изменчивости, нерегулярности и сложной внутренней структуры магнитных сигналов задача их обработки и анализа является весьма сложной. Существующие методы анализа вариаций магнитного поля основаны на операциях сглаживания, что дает большое усреднение, маскирует динамику возмущений и влечет существенную потерю важной информации [2, 3, 4]. В связи с этим они не обеспечивают требуемую точность и при автоматизации процедуры определения K-индекса. Погрешности некоторых из предложенных методов [3] связаны с отсутствием средств адаптации к изменчивости Sq-кривой с течением времени. Другие [4] основаны на предварительной обработке исходных магнитных данных, преобразующей их, и, как следствие, искажающей конечный результат получения K-индекса.

Основу современных систем обработки, анализа и распознавания сложных сигналов составляют последние достижения в области цифровой обработки сигналов, включающие методы адаптивной фильтрации, основанные на построении нелинейных аппроксимирующих вейвлет-схем [5, 6]. Аппарат вейвлет-преобразования имеет обширный словарь базисов различной формы с компактными носителями, позволяет исследовать сигнал с достаточной степенью локализации и обеспечивает пол-

Конкурс молодых изобретателей Камчатского края 2010

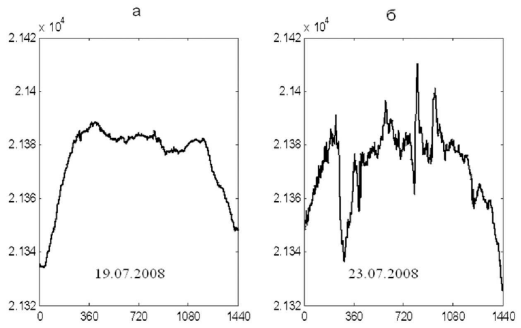


Рис. 1. Магнитные сигналы: а — спокойная суточная вариация; б — возмущенная суточная вариация. На оси OX отмечены отсчеты сигнала (1 отсчет соответствует 1 минуте), на оси OY — значения H компоненты магнитного поля Земли (в нТл).

ное сохранение информации. Полученные на основе вейвлет-преобразования представления сигналов содержат трендовые составляющие и локальные разномасштабные особенности, формирующие сложный сигнал в локальные моменты времени. В случае магнитных данных эти особенности несут важную информацию о величине отклонений от среднего уровня процесса и характеризуют возмущенность магнитного поля. Используя конструкцию вейвлет-пакетов, в данной работе предложен метод, осуществляющий декомпозицию магнитного сигнала на составляющие, и на основе заложенных в алгоритм решающих правил, идентифицирующий возмущения, определяющий их интенсивность и формирующий Sq-кривую.

Описание метода

Выделение структурных компонент сигнала на основе вейвлет-пакетов. Если $\{\Psi_j(2^j t-n)\}_{n\in Z}$ является ортонормированным базисом пространства W_j с разрешением 2^j и h, q — пара сопряженных зеркальных фильтров, определяемых формулами

$$\Psi^0_{j-1}(t)=\sum_n h_n\Psi_j(2^j t-n),$$
$$\Psi^1_{j-1}(t)=\sum_n q_n\Psi_j(2^j t-n),$$

то семейство $\{\Psi^0_{j-1}(2^j t-n),\Psi^1_{j-1}(2^j t-n)\}_{n\in Z}$ является ортонормированным базисом W_j [6]. Таким образом, сопряженные зеркальные фильтры преобразуют ортогональный базис $\{\Psi_j(2^j t-n)\}_{n\in Z}$ в два ортогональных семейства $\{\Psi^0_{j-1}(2^j t-n)\}_{n\in Z}$ и $\{\Psi^1_{j-1}(2^j t-n)\}_{n\in Z}$. Пространства W^0_{j-1} и W^1_{j-1}, порожденные каждым из этих семейств, ортогональны и $W^0_{j-1}\bigoplus W^1_{j-1}=W_j$. Рекурсивное расщепление пространств на основе этой процедуры в вейвлет-теории называют деревом пространств вейвлет-пакетов.

Не нарушая общности, будем считать, что исходный магнитный дискретный сигнал f_0 имеет разрешение $j=0$. На основе конструкции вейвлет-пакетов он может быть представлен в виде [5]:

$$f_0(t)=\sum_{j=-1}^{-m} g_j(t)+f_{-m}(t), \qquad (1)$$

где $g_j\in W_j$, $f_{-m}\in V_{-m}$; W_j, V_{-m} — пространства вейвлет-пакета,

$$g_j=\sum_n^{N*2^j} d^j_n\Psi_{j,n}(t),$$
$$f_{-m}=\sum_n^{N*2^{-m}} c^{-m}_n\Phi_{-m,n}(t),$$

$d^j_n=\langle f_0,\Psi_{j,n}\rangle$, $c^{-m}_n=\langle f_0,\Phi_{-m,n}\rangle$, $\Psi_{j,n}$ — вейвлет-функция, $\Phi_{-m,n}$ — скэйлинг-функция, N — длина сигнала.

Схема представления магнитного сигнала на основе (1) показана на рис. 2.

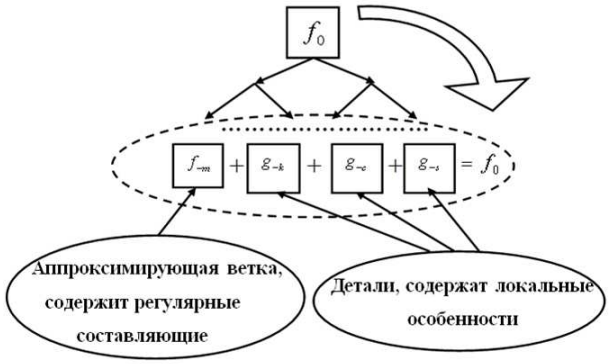


Рис. 2. Схема представления магнитного сигнала в пространстве вейвлет-пакетов.

Компоненты g_j в соотношении (1) являются детализирующими, включают в себя приращения порядка 2^{-j} и содержат информацию о локальных особенностях сигнала [5, 6], f_{-m} — сглаженная компонента, содержит регулярные характеристики сигнала.

После отображения сигнала в вейвлет-пространство локальные особенности могут быть идентифицированы на основе превышения абсолютных значений вейвлет-коэффициентов детализирующих компонент $|d^j_n|$ некоторого порогового значения T_j [6]. Выбор пороговых значений T_j должен быть основан на анализе структурных особенностей исследуемых сигналов (амплитуда флуктуаций, частотно-временные характеристики и др). Результаты обработки и анализа магнитных сигналов показали, что геомагнитные возмущения являются многомасштабными и проявляют себя на различных масштабных уровнях j (рис. 3). Построим

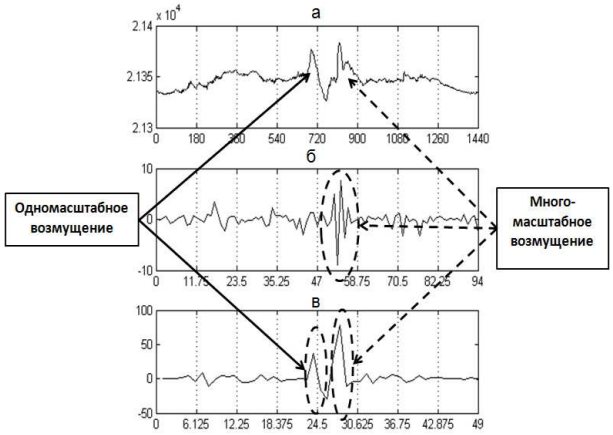


Рис. 3. Разложение магнитного сигнала на вейвлет-компоненты: а — суточная вариация; б — компонента четвертого уровня разложения; в — компонента пятого уровня разложения. На оси OX отмечены отсчеты сигнала, на оси OY: а — значения H компоненты магнитного поля Земли (в нТл); б, в — значение вейвлет-коэффициентов.

процедуру идентификации возмущений на основе следующих решающих правил:

1) если $|d_n^j| = |\langle f, \Psi_j^p \rangle| > T_j$, то в сигнале имеем возмущение, соответствующее масштабному уровню j (период колебаний 2^{-j});
2) если $\sum\limits_{j \in I_M} |d_n^j| > T_{\text{sum}}$, имеем многомасштабное возмущение, проявляющее себя на масштабах $j \in I_M$ (I_M — множество индексов, M — размерность множества, характеризующая масштабы физического процесса).

Определение компонент сигнала g_j, содержащих возмущения, и значений T_j и T_{sum} выполним на основе следующего алгоритма:

1. Построим полное дерево разложения:
   $W_j^0 = \bigoplus\limits_{j=1}^{I} W_j^p$, где g_j, $f_{-m} \in W_j$;
   $\{\Psi_j^p(2^j t - k)\}_{k \in Z}$ есть базис пространства W_j^p.
2. На основе анализа спокойных дней определим пороговые значения T_j и T_{sum}:
   $T_j = \max\limits_{Sq} \max\limits_{k} |d_{k,Sq}^j|$; $T_{\text{sum}} = \sum\limits_j T_j$,
   Sq — индекс спокойного дня.
3. Идентифицируем компоненты сигнала, содержащие возмущения g_j, $j \in I_M$:
   (а) для каждой компоненты сигнала g_i определим моменты времени k возникновения локальных особенностей;
   (б) сравним соответствующие значения вейвлет-коэффициентов спокойных и возмущенных дней; если $|d_{k,D}^j| > |d_{k,Sq}^j|$, то компонента g_j содержит возмущения и $j \in I_M$; D — индекс возмущенного дня.

Выделенные компоненты g_j содержат информацию о магнитной буре, ее интенсивность может быть определена из соотношений

$$I_j = \max_k |d_k^j|, \quad I_{\text{sum}} = \sum_j I_j.$$

Процедура идентификации спокойного дня может быть реализована на основе следующего правила: $|d_k^j|$ и $\sum\limits_j |d_k^j|$ текущего дня со значениями T_j и T_{sum}, если $\forall j \max\limits_k |d_k^j| \leqslant T_j$ и $\sum\limits_j \max\limits_k |d_k^j| \leqslant T_{\text{sum}}$, то текущий день является спокойным днем, в противном случае — возмущенным днем.

Автоматический алгоритм формирования Sq-вариации и вычисления K-индекса. На основе описанной методики предложен следующий автоматический алгоритм определения K-индекса:

1. В память загружается сигнал составляющей магнитного поля текущего дня и осуществляется проверка, является ли он спокойным.
2. Если текущий день определен как спокойный, то он замещает первый день в тройке ближайших к текущей дате спокойных дней.
3. Рассчитывается Sq-вариация: используются значения трех спокойных дней, ближайших по дате к текущему дню, их соответствующие значения складываются и делятся на 3.
4. На основе полученной Sq-вариации далее определяется K-индекс по методике, соответствующей ручному способу, предложенному Дж. Бартельсом: на основе разницы между наибольшим и наименьшим отклонениями в течение трехчасового интервала реальной магнитограммы от значения Sq-кривой определяется амплитуда возмущения, которая потом переводится по соответствующей геомагнитной широте шкале в K-индекс.

Результаты экспериментов

В качестве экспериментальных данных использовались вариации магнитного поля Земли, полученные на обсерватории «Паратунка» (с. Паратунка, Камчатская область). Вейвлет-разложение осуществлялось на основе вейвлетов классов Добеши, койфлетов и биортогональных, до пятого уровня полного вейвлет-дерева. На основе описанного выше алгоритма, используя магнитные данные за 2008 г., были определены компоненты магнитного сигнала, содержащие возмущения (рис. 4), и значения T_j и T_{sum}.

Результат расчета значений функций $\max\limits_k |d_j^k|$ и $\sum\limits_{j \in I_m} \max\limits_k |d_j^k|$ для спокойных и возмущенных дней (рис. 5) подтвердил эффективность предложенной в данной работе процедуры идентификации спокойного дня. Используя описанный выше алгоритм

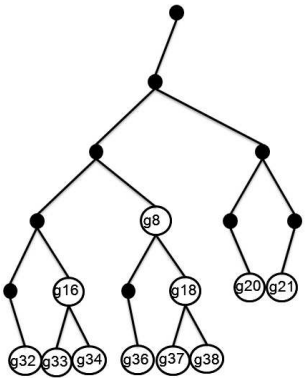


Рис. 4. Информативные компоненты вейвлет-пакета. Кругом отмечены информативные компоненты.

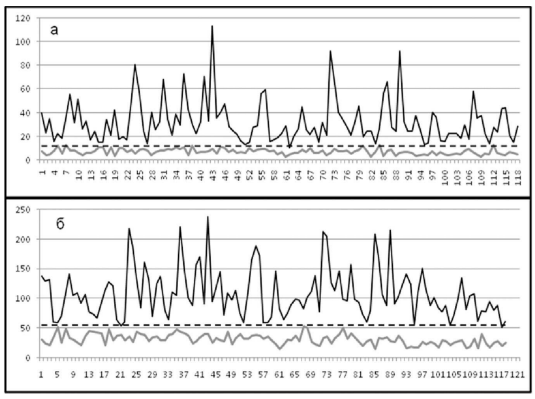


Рис. 5. Результат обработки магнитных данных обсерватории «Паратунка» за 2008 г. На оси OX отмечены отсчеты сигнала, на оси OY: а — значения функции $|d_n^{-5}|$; б — значения функции $\sum_{j\in I_M} |d_n^j|$ Черной линией отмечены возмущенные дни, серой — спокойные дни.

формирования Sq-вариации и вычисления K-индекса, были обработаны данные за период 2002-2008 гг. Статистический анализ полученных результатов показал, что наименьшую погрешность расчетов обеспечивает функция Добеши 3-го порядка (рис. 6). Результат расчета Sq-кривой по трем спокойным дням текущего месяца показан на рис. 7. Результаты расчетов K-индекса показали, что предлагаемый метод является удовлетворительным по точности. В таблице 1 приведены результаты определения K-индекса соответственно предлагаемым методом и ручным методом за первые десять дней апреля 2002г.

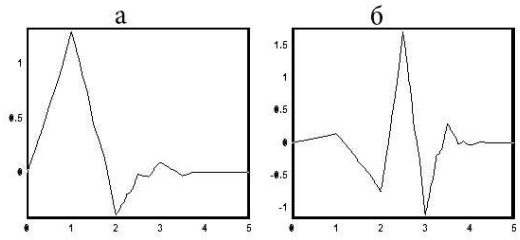


Рис. 6. Вейвлет-фильтры Добеши 3-го порядка: а — скэйлинг-функция; б — вейвлет-функция.

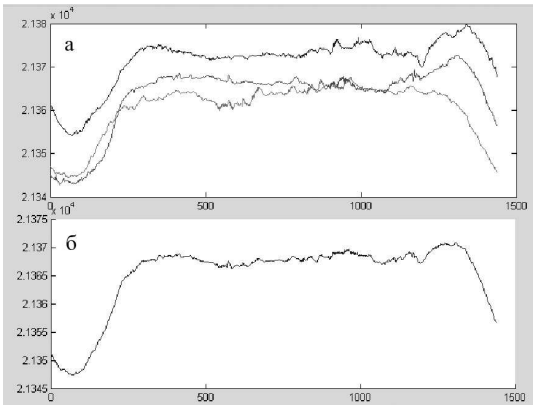


Рис. 7. Расчет Sq-кривой по трем спокойным дням за ноябрь 2008 г.: а — споконые суточные вариации за ноябрь 2008 г.; б — полученная Sq-вариация.

Таблица 1. Результаты расчета K-индекса.

Дата	Ручной	Автоматический
01.04.2002	2 3 3 3 3 3 2 2	2 3 3 3 2 2 2 3
02.04.2002	2 3 4 3 2 1 1 2	3 3 4 3 2 1 2 3
03.04.2002	2 3 3 3 2 2 3 2	2 3 3 3 2 2 2 2
04.04.2002	1 1 2 3 3 1 1 1	1 1 2 3 3 1 2 2
05.04.2002	1 2 1 0 1 0 0 1	2 2 1 0 0 0 0 2
06.04.2002	2 1 1 2 2 1 2 0	2 1 1 2 2 1 2 0
07.04.2002	1 1 3 2 2 2 1 0	1 1 2 2 2 2 0 0
08.04.2002	1 1 1 0 0 0 1 1	2 1 1 0 0 0 0 1
09.04.2002	2 0 1 0 1 1 0 1	3 1 1 0 1 1 0 2
10.04.2002	0 1 1 1 2 2 1 2	1 1 1 1 2 2 2 2

Литература

[1] *Bartels J.* Potsdamer erdmagnetische Kennziffern, 1 Mitteilung. // Zeitschrift fur Geophysik, 14:68–78 — Pp. 699–718.
`www-csli.stanford.edu/icml2k/craft.html`.

[2] *Будько Н., Зайцев А., Карпачев А., Козлов А., Филиппов Б.* Космическая среда вокруг нас. — Троицк: ТРОВАНТ, 2006. — 232 с.

[3] *Nowozynski K.* Calculate geomagnetic activity K indices using the Adaptative Smoothing method.
`http://www.intermagnet.org/Software_e.html`.

[4] *Головков В. П., Папиташвили В. О., Папиташвили Н. Е.* Автоматизированное вычисление K-индексов с использованием метода естественных ортогональных составляющих // Геомагнетизм и аэрономия, 1989. — С. 667–670.

[5] *Мандрикова О. В.* Моделирование геохимических сигналов на основе вейвлет-преобразования. — Владивосток: Дальнаука, 2007. — 123 с.

[6] *Mallat S.* A Wavelet tour of signal processing. — Пер. с английского — Москва: Мир, 2005.

Многомасштабный корреляционный анализ в задачах распознавания эпилептических разрядов*

Анциперов В. Е., Обухов Ю. В.
antciperov@cplire.ru
Москва, Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН

Приводятся результаты исследований по обнаружению эпилептических разрядов в записях ЭЭГ. Целью проведенных исследований была разработка новых процедур автоматического обнаружения и выделения эпилептических разрядов в записях ЭЭГ на основе разработанного авторами метода многомасштабного корреляционного анализа. Показано, что на основе предложенного подхода удается эффективно оценивать наличие или отсутствие квазипериода сигнала, в частности, определять моменты времени появления/окончания фрагментов квазипериодичности. В докладе приведены результаты анализа как в случае численного моделирования сигналов с нарушением периодичности, так и в случае обработки реальных ЭЭГ записей.

Application of multiscale correlative analysis to the problems of epileptic discharges recognition*

Antciperov V. E., Obukhov Y. V.
Kotel'nikov Institute of Radio-Engineering and Electronics of RUS, Moscow, Russia

The results on investigation of the problem of epileptic discharges in EEG records detection and presented. The utilization of multiscale correlative analysis for this problem is in the center of discussion. The results obtained are illustrated by modeling examples and an examples of real EEG records processing.

Обнаружение эпилептических разрядов в записях ЭЭГ является одним из основных методов диагностики эпилепсии. Существует несколько подходов к проблеме автоматизации решения этой задачи. Ранние методы обнаружения основывались на спектральном анализе Фурье, авторегрессионной обработке, использовании метода экспонент Лупанова и т. д.

Однако классические методы существенно предполагают стационарность сигнала, каковыми ЭЭГ записи не являются. Поэтому на сегодняшний день большое внимание уделяется нелинейным, ориентированным на нестационарные сигналы подходам. В данном докладе обсуждается один из таких, разработанных авторами подходов — многомасштабный корреляционный анализ (МКА) и его использование в задаче обнаружения эпилептических разрядов.

На рис. 1 представлена типичная запись ЭЭГ фрагмента эпилептического разряда [1]. Из вида записи следует, что разряд не является в классическом смысле периодическим сигналом, хотя некоторые элементы имеют тенденцию к повторениям. Именно для анализа таких сигналов (для обнаружения повторов) изначально разрабатывался подход с использованием МКА. Некоторые результаты, которые удалось получить на основе МКА применительно к задаче распознавания эпилептических разрядов, обсуждаются далее в основной части доклада.

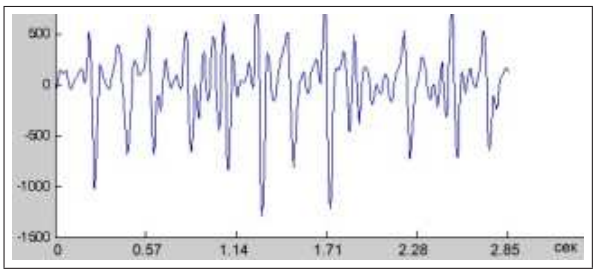


Рис. 1. Фрагмент эпилептического разряда реальной записи ЭЭГ. По вертикали — значения электрического потенциала одного из отведений в микровольтах (μV), по горизонтали — время в секундах.

МКА в задачах распознавания квазипериодических фрагментов и их границ

Основные принципы МКА ранее были изложены в ряде публикаций [2–6]. Формально МКА использует некоторую квадратичную по отношению к сигналу процедуру обработки с результирующим распределением $r(t, \vartheta)$ (см. ниже), являющимся Фурье-преобразованием по частоте от некоторого частотно–временного распределения Коэновского класса [7], т. е. распределением во время–временной области. Поэтому в центре внимания МКА находятся вопросы временной структуры сигнала, в частности повторяемости и степени повторяемости его формы на разных временных масштабах ϑ в окрестности каждого из анализируемых моментов времени t.

С целью кратко напомнить формализм МКА и согласовать обозначения, приведем конструкцию

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №08-01-00887, 08-02-01312.

распределения $r(t,\vartheta)$, используемую как основное средство анализа:

$$r(t,\vartheta) = \frac{\int S_L\big(t'+t-\frac{\vartheta}{2}\big)S_R\big(t'+t+\frac{\vartheta}{2}\big)\,dt'}{\sqrt{\int S_L^2\big(t'+t-\frac{\vartheta}{2}\big)\,dt'}\sqrt{\int S_R^2\big(t'+t+\frac{\vartheta}{2}\big)\,dt'}},$$

где

$$S_L(t') = G\big[\tfrac{2}{\vartheta}\big(t'-t+\tfrac{\vartheta}{2}\big)\big]x(t'),$$
$$S_R(t') = G\big[\tfrac{2}{\vartheta}\big(t'-t-\tfrac{\vartheta}{2}\big)\big]x(t')$$

— фрагменты анализируемого сигнала $x(t')$, выделенные слева и справа от текущего момента времени t окнами $G\big[\frac{2}{\vartheta}\big(t'-t+\frac{\vartheta}{2}\big)\big]$ и $G\big[\frac{2}{\vartheta}\big(t'-t-\frac{\vartheta}{2}\big)\big]$, см. рис. 2. Взвешивающие окна помимо смещений

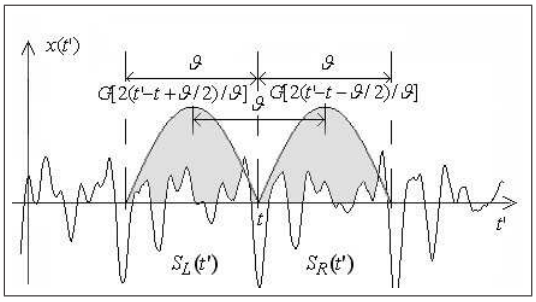


Рис. 2. Сигнал $x(t')$ и выделенные окнами $G\big[\frac{2}{\vartheta}\big(t'-t+\frac{\vartheta}{2}\big)\big]$ и $G\big[\frac{2}{\vartheta}\big(t'-t-\frac{\vartheta}{2}\big)\big]$ фрагменты $S_L(t')$ и $S_R(t')$ длительности ϑ, расположенные симметрично относительно текущего момента времени t (с взаимным смещением ϑ).

аргументов на $t\pm\frac{\vartheta}{2}$ зависят также от масштаба ϑ (в знаменателе), определяющего длительность фрагментов. Форма окон $G(\xi)$ симметрична, финитна на интервале $(-1,+1)$ и нормирована условием $\int G^2(\xi)\,d\xi = 1$. С учетом приведенных уточнений корреляционное распределение $r(t,\vartheta)$ имеет вид:

$$r(t,\vartheta) = \frac{\int G^2\big(\frac{2t'}{\vartheta}\big)x(t'+t_-)\,x(t'+t_+)\,dt'}{\sqrt{\int G^2\big(\frac{2t'}{\vartheta}\big)x(t'+t_-)dt'}\sqrt{\int G^2\big(\frac{2t'}{\vartheta}\big)x(t'+t_+)dt'}},$$

где $t_\pm = t\pm\frac{\vartheta}{2}$, пределы интегрирования можно считать бесконечными, хотя реально, ввиду финитности $G(\xi)$, они составляют $\pm\frac{\vartheta}{2}$.

Смысл распределения $r(t,\vartheta)$ весьма прост — это скалярное произведение нормированных фрагментов $S_L(t')$ и $S_R(t')$. По виду оно напоминает обычный коэффициент корреляции, однако, ввиду зависимости окон от масштаба, параметр ϑ приобретает смысл не столько смещения окон, сколько размера (масштаба) сравниваемых фрагментов. Значения распределения, близкие к единице, говорят

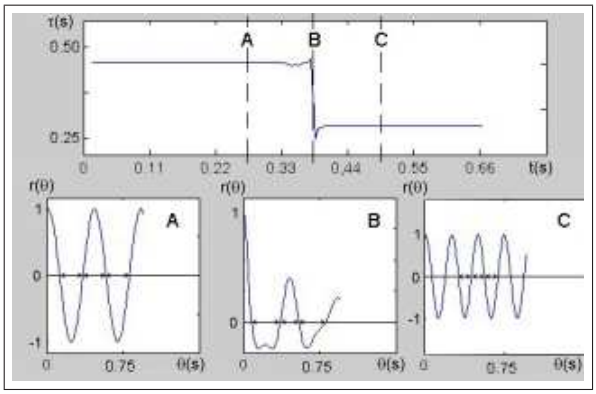


Рис. 3. Верхний график: МКА оценка периода колебаний τ сигнала $x(t)=\sin(2\pi\nu t)$, частота ν которого в момент времени $t=0{,}38$ с. скачком изменяется от 2,1 до 3,9 Гц. Внизу приведены графики зависимости многомасштабного распределения от величины масштаба для трех моментов времени (A) — до изменения частоты ($t=0{,}28$ с.), (B) — в момент изменения ($t=0{,}38$ с.) и (C) — после скачка частот ($t=0{,}49$ с.).

о хорошей повторяемости фрагментов на соответствующих масштабах, близкие к нулю — о их непохожести.

В работах [2–5] детально проанализированы особенности МКА и приложения метода к сигналам различной природы. Показано, что хотя распределение $r(t,\vartheta)$ не позволяет так же хорошо, как при спектральном анализе, выяснить частотный состав сигнала, на основе МКА удается гораздо лучше отслеживать основную частоту и ее динамику в случае изменения последней со временем. В частности, МКА в гораздо большей степени свободен от такого недостатка спектрального анализа, как эффект просачивания частот. Другими словами, МКА ценой огрубления информации о форме колебаний предоставляет более адекватные данные о изменениях колебательного режима, имеющих место в случае нестационарности. В качестве иллюстрации сказанному на рис. 3 представлен модельный синусоидальный сигнал у которого в некоторый момент времени (B) скачком изменяется частота колебаний (с 2,1 до 3,9 Гц). На верхнем графике представлена основанная на МКА оценка периода (см. далее), нижние три графика представляют зависимость распределения $r(t,\vartheta)$ от параметра масштаба ϑ для трех моментов времени t: (A) — до изменения, (B) — в момент изменения и (C) — после изменения частоты. Отметим, что резкий характер изменения оценки в момент (B) позволяет очень точно определить момент изменения колебательного режима сигнала.

Для того чтобы количественно оценить степень квазипериодичности сигнала на текущий момент времени необходимо связать с корреляционным распределением $r(t,\vartheta)$ некоторые количественные характеристики, например оценку периода, если

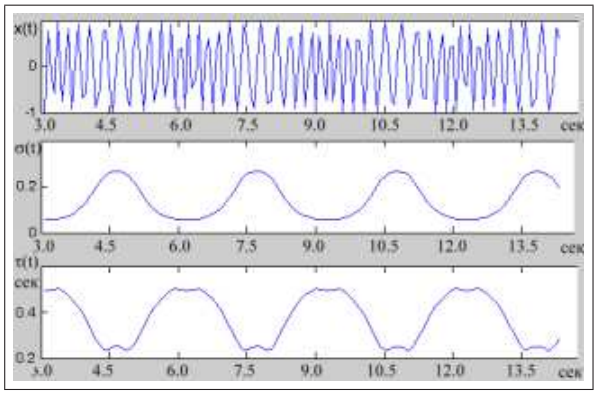


Рис. 4. Результаты моделирования обработки частотно-модулированного сигнала $x(t) = \sin\big(2\pi\nu t + m2\pi\nu\cos(2\pi Ft)/2\pi F\big)$ (вверху). Графики $\sigma(t)$ (в середине) и $\tau(t)$ (внизу) представляют динамику оценок степени квазипериодичности и локального периода сигнала во времени.

таковая имеет смысл. В ряде последних работ [4–6] показано, что наиболее стабильные оценки периода получаются по нулям распределений — моментам пересечения корреляционным распределением оси абсцисс (см. рис. 3). Именно, если считать, что $\tau_1, \ldots, \tau_n$ представляют собой интервалы между соседними нулями распределения $r(t, \vartheta)$ на текущий момент времени t, то статистики σ и τ:

$$\sigma = \frac{\tau_{\max} - \tau_{\min}}{\tau_{\max} + \tau_{\min}}, \quad \tau = \tau_{\max} + \tau_{\min}$$
$$\tau_{\max} = \max(\tau_i), \quad \tau_{\min} = \min(\tau_i),$$

дают адекватные оценки степени квазипериодичности и, если σ имеет приемлемый уровень $\sigma \ll 1$, локального периода. Интерпретация этих оценок достаточно проста и наглядна, если обратиться к рис. 3. В случаях (A) и (C) $\tau_{\max} \approx \tau_{\min}$ и $\sigma \approx 0$, откуда следует, что $\tau \approx 2\tau_{\max} \approx 2\tau_{\min}$ адекватная оценка периода. В случае (B) $\tau_{\max} \gg \tau_{\min}$ и $\sigma \approx 1$, откуда следует, что локально квазипериодичность отсутствует и нет смысла в оценке периода.

Применение изложенного подхода к частотно-модулированным сигналам проиллюстрировано на рис. 4, где приведены графики модельного сигнала $x(t) = \sin\big(2\pi\nu t + m2\pi\nu\cos(2\pi Ft)/2\pi F\big)$ (с частотой $\widehat{\nu} = \big(1 - m\sin(2\pi Ft)\big)\nu$, $\nu = 3\,\text{Гц}$ — несущая частота, $m = 0,3$ — глубина модуляции, $F = 0{,}25\,\text{Гц}$ — частота модуляции) и оценок $\sigma(t)$ и $\tau(t)$. Из приведенного рисунка видно, что даже при относительно высокой глубине модуляции m ($\sim$30%) получаются вполне приемлемые оценки степени квазипериодичности $\sigma \leqslant 0{,}3$ и локального периода, что свидетельствует о адекватности предложенного подхода.

Результаты применения МКА к реальным ЭЭГ записям

На данный момент применение изложенного подхода к задачам распознавания эпилептических разрядов осуществлено для нескольких баз данных ЭЭГ записей (с эпилептическими разрядами), ниже кратко проиллюстрированы типичные результаты. Замечание: на приведенных иллюстрациях с целью подчеркнуть границы разрядов представлена не сама величина σ, а индикатор непревышения ею порогового значения 0.2, (1 — ниже порога — выраженная квазипериодичность, 0 — выше порога — квазипериодичности нет). Значение порога σ в 0.2 соответствует 20% допустимой относительной ошибке в определении периода на основе оценки τ.

Наиболее яркие и контролируемые результаты получены для записей ЭЭГ крыс с эпилептическим синдромом (предоставленные д.б.н Кузнецовой Г. Д., Институт высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН), находящихся под воздействием галоперидола. Отметим, что в данном случае разряды хорошо выражены — имеют мощность превышающую фон и выделение разрядов при помощи предложенного метода допускает визуальный контроль. На рис. 5 представлены результаты обработки выраженного одиночного разряда (в правой части графика). Отметим, что помимо длинного, визуально различимого разряда метод определяет несколько коротких предшественников. На рис. 6 представлены результаты обработки последовательности разрядов. Отметим, что методом удается определить границу завершения серии.

Менее интерпретируемые и контролируемые результаты получены для записей ЭЭГ пациентов-людей из базы данных Боннского университета (Department of Epileptology, University of Bonn) [1]. Впрочем, следует отметить, что и в этом случае типичными являются ситуации подобные описанным выше в случае ЭЭГ крыс — рис. 7 представляет ситуацию подобную серии разрядов, а рис. 8 скорее соответствует отдельно отстоящим разрядам.

Выводы

Подводя итоги полученным на сегодняшний день результатам, отметим, что в простых, модельных ситуациях подход с использованием МКА обладает весьма достойными характеристиками — там, где классические методы начинают сталкиваются с трудностями, метод дает вполне интерпретируемые оценки. Что же касается обработки реальных данных, полученные результаты следует рассматривать по-видимому только как предварительные и предстоит большая работа по доведению метода до уровня, пригодного к использованию «вне лаборатории».

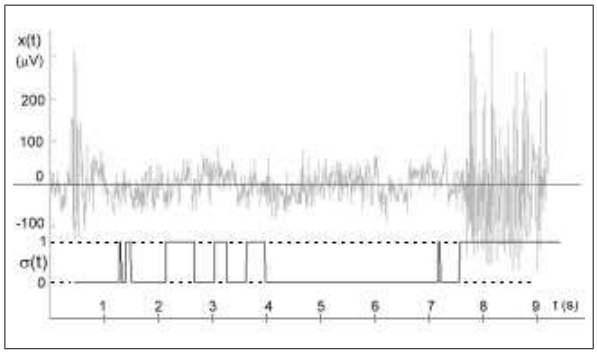


Рис. 5. Выраженный одиночный разряд у крысы под галоперидолом.

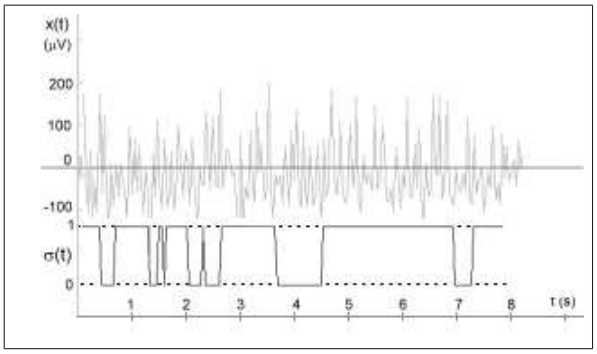


Рис. 7. Серия разрядов у пациента — человека.

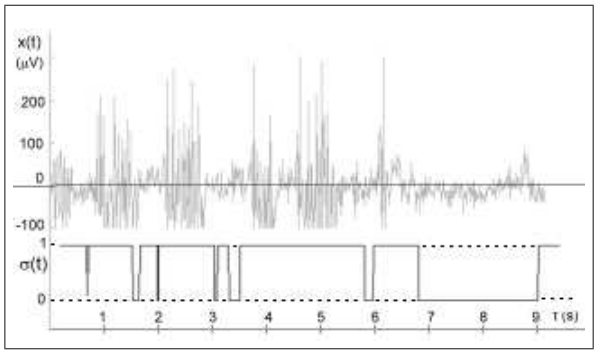


Рис. 6. Серия разрядов у крысы под галоперидолом.

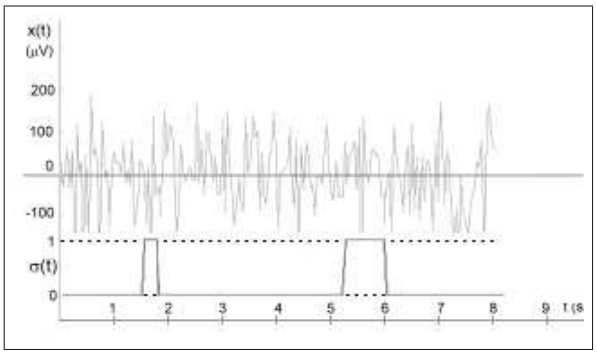


Рис. 8. Одиночные разряды у пациента — человека.

Литература

[1] *Andrzejak R. G., Lehnertz K., Rieke C. et al.* Indications of nonlinear deterministic and finite dimensional structures in time series of brain electrical activity: Dependence on recording region and brain state // Phys. Rev. — 2001. — E, No. 64. — Pp. 1207–1216.

[2] *Анциперов В. Е.* Многомасштабный корреляционный анализ нестационарных, содержащих квазипериодические участки сигналов // Радиотехника и электроника. — 2008. — Т. 53, № 1. — С. 73–85.

[3] *Анциперов В. Е., Обухов Ю. В.* Двумерное многомасштабное представление данных ЭЭГ записей эпилептических разрядов // Альманах клинической медицины. — 2008. — Т. XVII, № 1. — С. 154–157.

[4] *Анциперов В. Е., Обухов Ю. В., Кузнецова Г. Д., Габова А. В.* Многомасштабный корреляционный анализ разрядов пик-волна абсансной эпилепсии // Труды II Всероссийской научно-практической конференции «Количественная ЭЭГ и нейротерапия», Санкт-Петербург, 2009.

[5] *Анциперов В. Е.* Обнаружение и оценка частотных сдвигов в нестационарных процессах на основе многомасштабного корреляционного анализа // Доклады XIV-ой Всероссийской конференции «Математические методы распознавания образов» (ММРО-14), Суздаль, 2009. — С. 293–296.

[6] *Antsiperov V. E., Obukhov Y. V., Mansurov G. K.* Heart Rate Wireless Monitoring System “Cardiobeat”, Novel Approach to ECG Processing and Representation // Key Engineering Materials. — 2010. — Vol. 437. — Pp. 402–406.

[7] *Cohen L.* Time Frequency Analysis: Theory and Applications. — New Jersey, Prentice Hall PTR 1995.

Идентификация личности по форме ладони и голосу*

Бакина И. Г.
irina_msu@mail.ru
Москва, Московский Государственный Университет имени М. В. Ломоносова

В данной работе рассматривается система двумодальной идентификации личности, основанная на использовании признаков ладони и голоса человека. Одна из модальностей рассматривается в качестве фильтра заведомо непохожих персон, а по второй осуществляется идентификация.

Person Identification by Palm Shape and Voice Features*

Bakina I. G.
Moscow State University named after M. V. Lomonosov, Moscow, Russia

Article describes two-modal identification system, which employs person palm and voice features. One of the modalities is treated as a filter for obviously unlike persons, while identification is carried out over the remaining modality.

В работе рассматривается система двумодальной идентификации личности, основанная на анализе признаков ладони и голоса человека. Использование при распознавании нескольких биометрических признаков объясняется тем, что одномодальные классификаторы не всегда обеспечивают требуемую надежность системы (ошибки 1-ого и 2-ого рода). Кроме того, использование нескольких модальностей позволяет ускорить работу системы, что важно для ее функционирования в режиме реального времени [3]. Рассматриваемые в работе признаки — признаки ладони и голоса человека — достаточны просты и удобны в предъявлении. По отдельности они не обладают высокой отличительной способностью, но комбинирование этих признаков позволяет значительно улучшить параметры надежности системы.

Рассматриваемый подход к двумодальной идентификации личности является продолжением работы, представленной в [5]. В предлагаемой работе улучшен метод идентификации личности по форме ладони; скорректирован подход к комбинированию классификаторов, позволяющий осуществлять идентификацию личности в режиме реального времени; проведены эксперименты на новых данных по оценке надежности системы и представлены дальнейшие направления развития и улучшения системы.

Общая схема системы

Рассматриваемая система идентификации личности основана на использовании двух биометрических характеристик человека — его ладони и голоса. Предполагается, что данные характеристики являются независимыми и, следовательно, могут быть проанализированы по отдельности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 08-01-00670 и 10-07-00609-а.

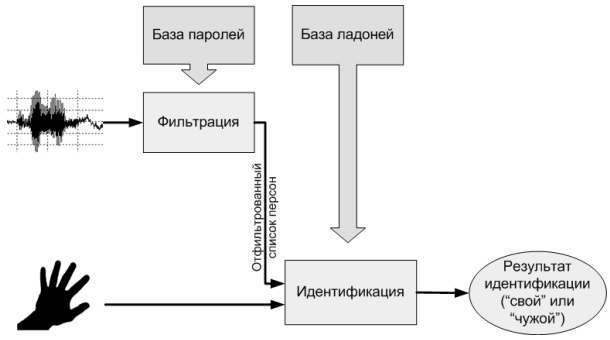


Рис. 1. Схема системы.

Общая схема представлена на рисунке 1. Система состоит из двух основных блоков — блока фильтрации и блока идентификации. Основное назначение блока фильтрации — исключение заведомо непохожих персон из последующей идентификации. Фильтрация осуществляется на основе анализа произнесенного человеком парольного слова. На этом этапе осуществляется последовательное сравнение произнесенного пароля со всеми эталонными записями парольных слов, хранящимися в базе. Далее составляется список «похожих» паролей и, соответственно, персон. Отфильтрованный список персон и предъявленное изображения ладони затем поступают на блок идентификации. После чего выносится окончательное решение о том, является ли человек пользователем системы («свой») или нет («чужой»).

На этапе фильтрации используются голосовые признаки человека. Обусловлено это тем, что голос человека может меняться. На него влияет эмоциональное состояние человека, некоторые болезни и т.д. Использовать голос как устойчивую характеристику в рамках рассматриваемого подхода невозможно. Однако он вполне подходит в качестве фильтра, уменьшающего множество персон для сравнения на этапе идентификации (по более

надежной характеристике), а также сокращает время выполнения этой идентификации.

Каждый из указанных блоков ниже рассматривается более подробно.

Фильтрация по парольному слову

В системе имеется заранее подготовленная база эталонных записей парольных слов для каждого пользователя. Хранимая запись пароля — это отдельный аудиофайл в формате wav. Продолжительность записи составляет в среднем 1–2 секунды. Для каждого человека может храниться несколько эталонных записей.

Каждый аудиосигнал сначала нормализуется по громкости. Далее из него выделяется основная часть, собственно сам пароль. Затем сигнал разбивается на перекрывающиеся фреймы. В качестве признакового описания фрейма рассматривается набор кепстральных коэффициентов [1, 2, 5]. Сравнение двух сигналов осуществляется с помощью динамического выравнивания фреймов. В качестве расстояния (по голосу) между тестовым паролем и персоной рассматривается минимальное расстояние между этим паролем и всеми эталонными записями пароля этой персоны.

Процесс определения списка персон «похожих» по парольному слову производится следующим образом. Сначала для произнесенного пароля последовательно вычисляется расстояние между этим паролем и каждой из персон в базе. После чего полученный список расстояний сортируется по возрастанию, и выбираются первые k персон. Используемое в работе значение параметра k определялось на основании проведенных экспериментов. Сначала была идея выполнять фильтрацию персон по некоторому пороговому правилу, но эксперименты показали, что использование абсолютных значений расстояний приводит к высоким ошибкам распознавания. При указанных признаках и вычислении близости возможно осуществить лишь ранжирование персон.

Эксперименты были проведены для группы из 35 человек. Для каждой персоны были сделаны по две эталонные записи парольного слова. В качестве тестовых использовались дополнительно записанные парольные слова по 2–3 на каждого человека (всего 90 записей). На рисунке 2 представлена полученная кривая FRR. По оси X отложены рассматриваемые значения параметра k, по оси Y — полученные значения величин в процентах.

Так как по голосовым признакам идентификация не производится, а лишь определяется группа «похожих» персон, то при построении графика использовалось следующее соображение. Если имя человека, сказавшего пароль, было в списке k ближайших персон, то распознавание считалось успешным. Иначе фиксировалась ошибка, и счетчик FRR увеличивался на 1.

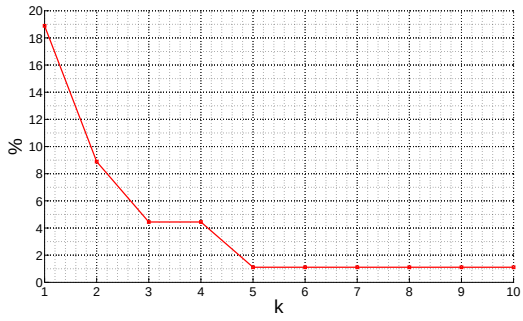


Рис. 2. FRR-кривая для распознавания по произнесенному паролю.

Анализ графика показывает, что если в списке «похожих» персон оставлять 3–4 ближайших, то величина FRR составит примерно 4.5%. При увеличении числа ближайших персон, FRR снижается до 1%. Таким образом, если рассматривать 5 персон, то удается уменьшить количество персон для последующего сравнения примерно в 7 раз. Это освобождает дополнительное время на проведение более точной идентификации по форме ладони.

Идентификация по форме ладони

Идентификация личности по форме ладони проводится путем последовательного сравнения предъявленной человеком ладони с эталонными ладонями, хранящимися в базе. Сравнение осуществляется только для персон, попавших в список «похожих» по голосу.

База ладоней собирается заранее и проходит некоторую предварительную обработку. Для получения изображений ладоней используется web-камера, с помощью которой делаются снимки размером 640×480 пикселей. Качество получаемых изображений таково, что позволяет различить и выделить только контуры самой ладони. При съемке человек позиционирует ладонь на однотонной горизонтальной платформе. Предварительная калибровка камеры позволяет сохранять информацию о реальном размере получаемого изображения.

При регистрации нового пользователя системы производится несколько снимков его ладони. Для каждого полученного изображения выполняется бинаризация, выделение ладони из фона и построение ее циркулярного графа [4]. Далее строится модель ладони в форме гибкого объекта [7]. Фактически, модель гибкого объекта есть описание циркулярного графа объекта с заданием множества допустимых деформаций.

Модель ладони. На рисунке 3 слева изображен скелет и множество кругов циркулярного графа ладони. Наиболее подвижной частью ладони являются пальцы, а именно основание основной фа-

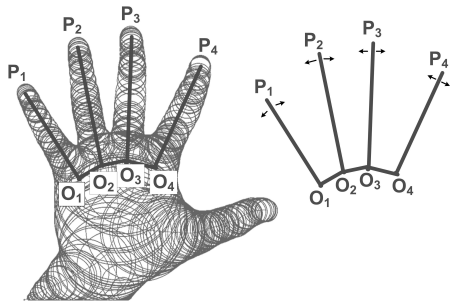


Рис. 3. Модель ладони в форме гибкого объекта.

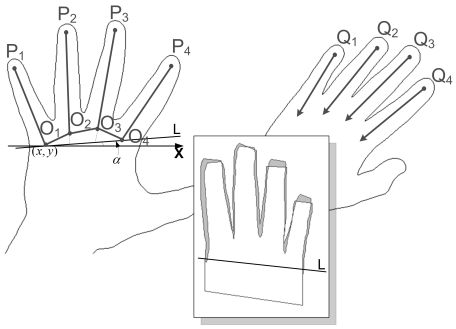


Рис. 4. Сравнение ладоней.

ланги. Если позиционировать ладонь на горизонтальной платформе, то пальцы достаточно свободно поворачиваются вокруг этого места в горизонтальной плоскости. Поэтому в качестве возможных трансформаций гибкого объекта предлагается рассматривать группу поворотов пальцев вокруг основания. В создаваемой модели ладони не учитывается большой палец. Он и кожа, окружающая его, более подвижны и значительно меняют свою форму при движении.

Возможно несколько вариантов определения точки поворота пальца ладони. В работе рассматривается полуавтоматический вариант, при котором предварительно выделяются ось, кончик и основание пальца. Точкой поворота считается точка на оси пальца, отстоящая от его основания на определенный процент длины самого пальца (примерно 25–30%). Возможен ручной вариант разметки эталонов экспертом. В рамках дальнейшего исследования планируется реализовать полностью автоматический режим, при котором точки поворотов определяются по серии последовательных снимков ладони во время «шевеления» пальцами.

На рисунке 3 найденные точки поворотов пальцев обозначены через O_i, где $i = 1, \ldots, 4$; P_i — кончики пальцев; прямые O_iP_i — оси пальцев. В работе предполагается, что ломаная линия $O_1O_2O_3O_4$, определяющая положение оснований основных фаланг пальцев, имеет фиксированную структуру и не меняется при возможных поворотах пальцев в горизонтальной плоскости. То есть длины отрезков ломаной и углы между этими отрезками фиксированы. При поворотах пальцев возможно лишь изменение углов между отрезками O_iP_i и O_1O_4. Обозначим эти углы через α_i.

Сравнение ладоней Основная идея сравнения ладоней заключается в «шевелении» эталонного гибкого объекта, при котором достигается наилучшее совпадение силуэтов эталона и тестовой ладони. На рисунке 4 слева изображен эталон, справа — тестовая ладонь, а в центре — наилучшее совмещение их силуэтов. Метод подгонки эталона под тест представлен в [7], а его реализация для сравнения ладоней в [6]. Подгонка заключается в совмещении средних пальцев обеих ладоней и повороте пальцев эталонной ладони на такие же углы, как и у тестовой. В целом, задача подгонки зависит от 6 параметров. Необходимо определить положение точки $O_1 = (x, y)$ начала ломаной и значения углов $\alpha_1, \ldots, \alpha_4$. Совмещая кончики средних пальцев и вводя предположение, что при предъявлении человек меньше всего меняет положение среднего пальца, можно свести задачу к оптимизации по трем параметрам — α_1, α_2 и α_4. В дальнейшем планируется реализовать полноценную подгонку по всем 6 параметрам.

Результаты экспериментов Для проведения экспериментов по сравнению ладоней были собраны изображения ладоней 21 человека. Всего имелось 80 изображений, разделенных вручную на эталоны (38 изображений) и контроль (42 изображения).

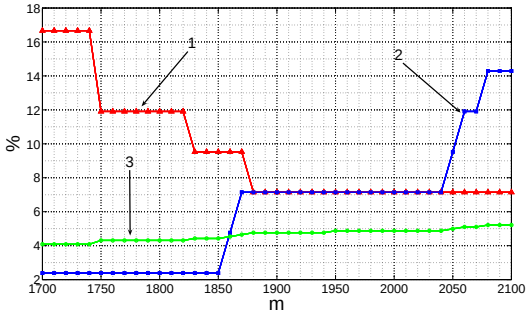


Рис. 5. ROC-кривая для распознавания по форме ладони: 1 — кривая FRR; 2 — кривая FAR; 3 — доля ладоней, удовлетворяющих порогу.

Для каждой персоны в базе имелось несколько эталонных ладоней. Близость тестовой ладони к эталонным ладоням персоны определялась как минимальное расстояние между тестовой ладонью и каждой из ладоней персоны. Таким образом, последовательно определялась близость тестовой ладони к ладоням всех пользователей системы. Затем выбиралось минимальное расстояние и, если оно было меньше значения порога m, ладонь классифицировалась как принадлежащая соответству-

ющей персоне из базы. При оценке FAR из рассмотрения исключалась персона, которой принадлежало распознаваемое тестовое изображение.

На рисунке 5 представлена ROC-кривая, полученная для собранной базы. По оси X отложены рассматриваемые значения порога m, по оси Y — полученные значения FRR в процентах.

Оценки FRR и FAR, получаемые в точке совпадения этих кривых составляют порядка 7%. При этом доля ладоней базы, удовлетворяющая рассматриваемому порогу, мала и составляет порядка 4–5%. Далее рассматривается, как эти показатели могут быть улучшены при использовании двух модальностей.

Идентификация по двум модальностям

Для проведения эксперимента была составлена объединенная база, содержащая в себе ладони и записи парольных слов 21 человек. Изображения ладоней были использованы те же, что и при проведении рассмотренного выше эксперимента по распознаванию личности по форме ладони. При составлении базы использовались записи парольных слов 21 человека из имеющихся 35.

База эталонов содержала 34 изображения ладоней и 23 записи парольных слов (1-2 на каждого человека). Таким образом оставалось 41 тестовых изображений и 55 записей паролей, из которых были сформированы 119 тестовых объектов. Оценка величины FAR осуществлялась так же, как и при идентификации по форме ладони: ошибка фиксировалась, если система признавала человека как «своего» при распознавании по базе, из которой этот человек был заведомо исключен.

Результаты эксперимента для нескольких значений параметров k и m приведены в таблице 1. Рассматривались значения, при которых одномодальные классификаторы показывали наилучшие результаты. При фильтрации персон по голосу рассматривалось 3, 5 и 7 ближайших, в качестве порога для распознавания по форме ладони брались значения в точках совпадения кривых FRR и FAR.

Таблица 1. Результаты эксперимента.

k	m	FRR	FAR
3	1900	5.6%	1.6%
5	1900	0.9%	1.6%
5	2000	0.9%	1.6%
5	2100	0.9%	6.7%

Из полученных результатов можно сделать вывод о том, что рассмотренное комбинирование позволяет значительно улучшить показатели FRR и FAR. Можно отметить, что если при фильтрации по парольному слову список «похожих» персон составлен верно, т.е. он содержит распознаваемую персону, то дальнейшая идентификация проходит без ошибок. Наблюдается снижение величины FAR по сравнению с одномодальной идентификацией. Таким образом, величина FRR в большей степени определяется значением FRR для распознавания по парольному слову, а FAR — по форме ладони.

Выводы

В работе представлен улучшенный подход к идентификации личности, основанный на использовании двух модальностей. Изменена роль модальностей: классификатор по голосовым признакам играет роль фильтра «похожих» персон, а идентификации проводится по форме ладони. Улучшен метод сравнения ладоней, основанный на подгонке эталонного образца под тестовый объект.

Дальнейшее исследование предполагается посвятить задачам автоматической разметки эталона по серии снимков ладони; более точной подгонки эталонной ладони под тестовую путем реализации полноценной оптимизации по всем шести параметрам; улучшения сравнения по парольному слову и изучения дополнительных возможностей ускорения работы системы. Также проведение более масштабных экспериментов по оценке надежности системы.

Литература

[1] *Theodoridis S, Koutroumbas K.* Pattern Recognition (second edition). — Elsevier, 2003.

[2] *Rose. P* Forensic Speaker Identification // Taylor & Francis, 2002. — 360 p.

[3] *Ross A. A., Nandakumar K., Jain A. K.* Handbook of Multibiometrics. — Springer, 2006. — 202 p.

[4] *Местецкий Л. М.* Непрерывная морфология бинарных изображений: фигуры, скелеты, циркуляры. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 288 с.

[5] *Бакина И. Г., Местецкий Л. М.* Многомодальная идентификация личности по форме ладони и голосу // Таврический Вестник Информатики и Математики, Симферополь, 2008. — С. 59–65.

[6] *Бакина И. Г., Местецкий Л. М.* Сравнение формы ладоней для задачи распознавания при наличии артефактов // Математичесике методы распознавания образов, доклады XVI Всероссийской конференции, Суздаль, 2009. — С. 301–304.

[7] *Бакина И. Г., Местецкий Л. М., Цискаридзе А. К.* Метод активного скелета в задаче распознавания формы изображений // ГрафиКон, 2009. — С. 279–282.

Интеллектуальный анализ цифровых рентгеновских снимков в системе для массовой диагностики остеопороза*

Бойко А. И., Ольшевец М. М., Устинин М. Н.
ustinin@impb.psn.ru
Пущино, Институт математических проблем биологии РАН

Предлагается метод определения минеральной плотности костной ткани по цифровому рентгеновскому снимку предплечья. На компьютерной приставке к медицинскому рентгеновскому аппарату выполняется снимок в нормированных условиях, которые обеспечиваются с помощью специального стенда, содержащего набор эталонных объектов с известной минеральной плотностью. Проводится цифровая коррекция искажений поля яркости, вносимых оптической системой и асимметрией рентгеновского пучка. Затем по эталонным объектам строится калибровочная кривая для оценки эквивалентной толщины изучаемого участка кости. Минеральная плотность костной ткани вычисляется как функция эквивалентной толщины с использованием геометрической модели кости, построенной по цифровому снимку. На основе предлагаемого метода ведется разработка аппаратно-программного комплекса для диагностики остеопороза с помощью цифровых рентгеновских систем общего назначения.

Intellectual analysis of digital X-ray images in the system for mass osteoporosis screening*

Boyko A. I., Ol'shevetz M. M., Ustinin M. N.
Institute of Mathematical Problems of Biology, Pushchino, Russia

The method of the bone mineral density estimation is proposed using the digital X-ray image of the radius. The normalized image, containing calibration step wedge with known mineral density, is obtained on the digital radiography system. The field of view distortions due to optics and X-ray flow asymmetry are corrected. Then the calibration curve is formed in order to estimate the equivalent thickness of the bone under study. The mineral density of the bone is calculated as a function of the equivalent density using the geometrical model of the bone, build from the digital image. Based on the method proposed, the hard-and-software system is developed for the osteoporosis diagnostics with the digital X-ray systems of general function.

Задачей настоящей работы является создание аппаратно-программного комплекса для определения рентгеновской плотности снимаемых объектов (денситометрия) по цифровому рентгеновскому снимку. Денситометрия является основным методом диагностики остеопороза — заболевания скелета, характеризующегося снижением плотности кости и нарушением структуры костной ткани. Остеопороз приводит к увеличению хрупкости костей и риска их переломов. Последствия остеопороза в виде переломов тел позвонков и трубчатых костей приводят к значительному подъему заболеваемости и смертности среди лиц пожилого возраста. В борьбе с этим заболеванием является решающим проведение массовой рентгеновской диагностики минеральной плотности костной ткани.

В настоящее время основным методом оценки минеральной плотности костной ткани является двухлучевая абсорбциометрия, выполняемая при помощи специализированного оборудования. В то же время известно [1], что результаты таких обследований хорошо коррелируют с результатами радиографической абсорбциометрии при съемке с эталонными объектами. При цифровой рентгеновской диагностике остеопороза, в поле съемки наряду с диагностируемым объектом включается эталонный объект с нормированной минеральной плотностью. Сравнивая яркости диагностического и эталонного объектов и зная реальную плотность эталона, можно определить плотность ткани. При этом ставится задача создания оборудования для получения стандартизованных рентгеновских снимков, допускающих автоматизированный анализ без участия оператора, а также программного обеспечения для такого анализа.

Для получения цифровых рентгеновских снимков используется компьютерная приставка к медицинскому рентгеновскому аппарату [2, 3, 4]. Приставка позволяет получать снимки в двух режимах — обзорном (395×315 мм) и прицельном (155×135 мм), при этом в обоих режимах разрешение снимка равно 1280×1024 пикселей с 4096 градациями яркости. Для задач денситометрии снимков предплечья используется прицельный режим. Фиксация объектов съемки в стандартном положении выполняется при помощи экспериментального стенда, включающего набор эталонных объектов с известной минеральной плотностью.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума Российской академии наук «Фундаментальные науки — медицине» и Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 09-07-12108, № 10-07-00300.

Программное обеспечение системы и предобработка снимков

Важной частью созданного аппаратно-программного комплекса является компьютерная программа получения, просмотра, анализа, обработки, хранения и распечатки цифровых рентгеновских изображений. Созданный программный комплекс объединяет в себе функции управления камерой, графического редактора и системы управления архивом цифровых снимков, сведений о проведенных обследованиях и личных данных пациентов [3, 4]. Программа обеспечивает выполнение следующих задач:

— получение цифрового снимка;

— хранение снимков и организация быстрого доступа к ним;

— визуализация снимков и операции цифровой диагностики;

— цифровая обработка снимков и печать на бумаге или пленке.

Относительно высокая зашумленность и низкая контрастность получаемого снимка могут приводить к появлению артефактов при неправильно выбранном сценарии обработки изображения. Поэтому наиболее широкое применение в повседневной рентгенологической практике находят алгоритмы обработки изображения из класса алгоритмов поэлементной обработки, а также некоторые алгоритмы сглаживания. В частности, имеется возможность коррекции изображения по интерактивно задаваемой пользователем передаточной функции. В состав программного комплекса включены шаблоны нескольких известных операторов свертки при различных размерах окна (гауссиан, лапласиан, и др.), пользователь может выбрать наиболее подходящую операцию, последовательно применять фильтры, задать в диалоговом режиме произвольное окно и матрицу весов фильтра и сохранить созданный шаблон для дальнейшего исследования и анализа снимка. Также реализованы некоторые нелинейные алгоритмы обработки изображений со скользящим окном.

Применение ортогональных разложений для коррекции и сжатия снимков

Наряду с шумоподавлением и повышением контрастности изображения важной задачей является сжатие цифровых рентгеновских снимков. Актуальность проблемы обусловлена необходимостью хранения большого числа полноформатных цифровых изображений и их передачи по каналам связи без потерь значимой диагностической информации. Для решения обеих задач использовались разложения по wavelet-базисам (базисам всплесков) [5], представляющим собой специфические системы ортогональных функций, хорошо подходящих для обработки резко меняющихся данных. Существуют эффективные алгоритмы быстрого преобразования исходного сигнала в пространство коэффициентов разложения. Дальнейшая обработка цифровых массивов с использованием wavelet-базисов ведется в пространстве коэффициентов. Методы разложений по базисам всплесков ведут к экономному решению многих задач обработки, требующих реализации в рамках ограниченных аппаратных или вычислительных ресурсов. Для осуществления сжатия в разложении цифрового изображения по выбранному базису сохраняют только коэффициенты с амплитудой, превышающей некоторый порог. При этом частично решается и задача шумоподавления. Фактически, с выбором порога решается задача нелинейной аппроксимации по элементам базиса, вносящим наибольший вклад в разложение. Дальнейшая обработка заключается в квантовании полученных коэффициентов разложения в соответствии с требуемым коэффициентом компрессии и последующем «сжатии без потерь» при помощи кода Хаффмана, арифметического кодирования и подобных методов. Нами использовались различные типы wavelet-базисов. Назовём для примера базис Хаара, имеющий наименьший носитель из всех wavelet-базисов. Элементами базиса являются разрывные функции. Также применялись ортонормированные wavelet-базисы с компактным носителем, у которых элементы базиса являются гладкими функциями, имеющими наименьшую асимметрию при данном количестве нулевых моментов среди всевозможных других базисов всплесков. В данных примерах использовался базис с элементами, имеющими 6 нулевых моментов. В применении к задачам медицинской бесплёночной рентгенографии удается достигнуть значительной степени сжатия (2- 3-кратной) хранимых цифровых рентгеновских снимков при сохранении приемлемого качества изображения.

Отметим факторы, затрудняющие денситометрию снимков. Цифровой рентгеновский снимок получается при помощи проекционной системы, оптика которой вносит неравномерность в поле яркости снимка. Кроме того, рентгеновское излучение обладает асимметрией в направлении вращения трубки. Нами была разработана методика одновременной коррекции этих искажений [6] при помощи корректирующей матрицы F_{corr}, которая строится как аппроксимация изображения чистого поля полиномами Чебышева второй степени (см. Рис. 1):

$$\tilde{P}_{i,j} = P_{i,j}/F_{\mathrm{corr}}(i,j),$$

$$F_{\mathrm{corr}}(i,j) = \sum_{m,n=0}^{2} C_{mn} T_m(x_i) T_n(y_j),$$

$$C_{mn} = \int T_m(x) \left[\int T_n(y) P(x,y) W(y) dy \right] W(x) dx.$$

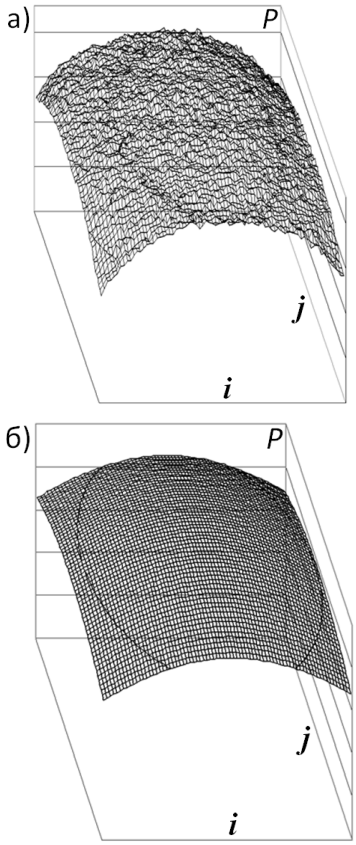


Рис. 1. Коррекция искажений поля яркости снимка, вносимых оптической системой и асимметрией рентгеновского пучка: а) снимок чистого поля зрения; б) корректирующая матрица, построенная по этому снимку. P — яркость, i и j — номера пикселей.

Здесь $P_{i,j}$ — яркость пиксела исходного снимка, $\tilde{P}_{i,j}$ — яркость пиксела после коррекции, $T_m(x)$ — полиномы Чебышева, $W(x)$ — весовая функция.

Рис. 1 иллюстрирует построение корректирующей матрицы по снимку чистого поля зрения, на котором видно резкое снижение яркости на краях снимка, затрудняющее денситометрию. Аппроксимация полиномами невысокой степени позволяет с хорошей точностью учесть эти искажения, одновременно исключив высокочастотные шумы. Деление на корректирующую матрицу позволяет выровнять поле зрения.

Анализ цифрового рентгеновского снимка

На Рис. 2 проиллюстрирован основной принцип предлагаемой методики денситометрии лучевой кости предплечья. Предплечье фиксируется в стандартном положении при помощи консоли, на которой размещены эталонные объекты, соответствующие по плотности гидроксиапатиту, и имеющие различную толщину. На снимке выделяются области с заданной плотностью гидроксиапатита, измеряется их яркость (оптическая плотность) и строится калибровочная кривая. Затем по калибровочной кривой определяется эквивалентная толщина измеряемой области кости в расчете на единичную плотность гидроксиапатита.

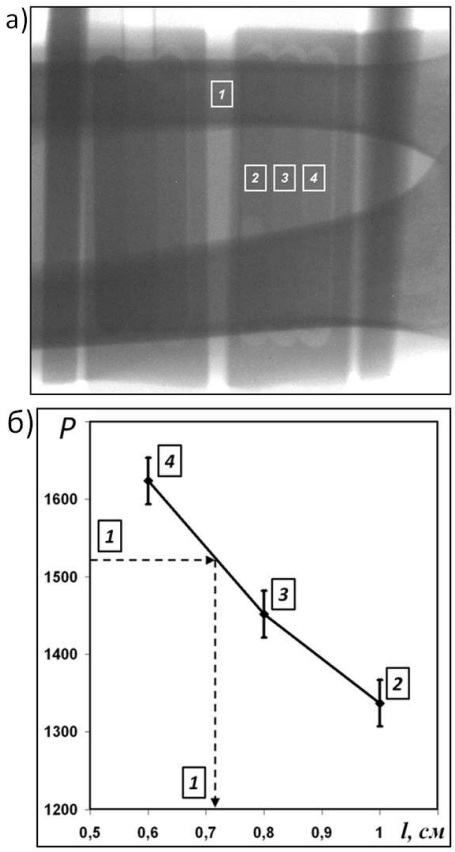


Рис. 2. Определение эквивалентной толщины участка кости по цифровому рентгеновскому снимку с эталоном. а) рентгеновский снимок предплечья: 1 — измеряемый участок лучевой кости; 2, 3, 4 — ступени эталона, соответствующие различным толщинам слоя гидроксиапатита. б) определение эквивалентной толщины костной ткани по калибровочной кривой: P — яркость (оптическая плотность), l — толщина слоя гидроксиапатита.

Моделирование формирования рентгеновского снимка

Для оценки требований, предъявляемых к точности измерений, а также для построения диагностической сцены проведено имитационное моделирование формирования рентгеновского снимка. Была построена модель сечения предплечья из конечных элементов объема (вокселей) с заданными коэффициентами экспоненциального поглощения. Для каждого пикселя в строке матрицы яркость формировалась как разность между входной интенсивностью и суммой интенсивностей, поглощенных всеми вокселями по ходу пучка (см. Рис. 3). По результатам моделирования был сделан вывод о том, что 12-битная оцифровка, используемая

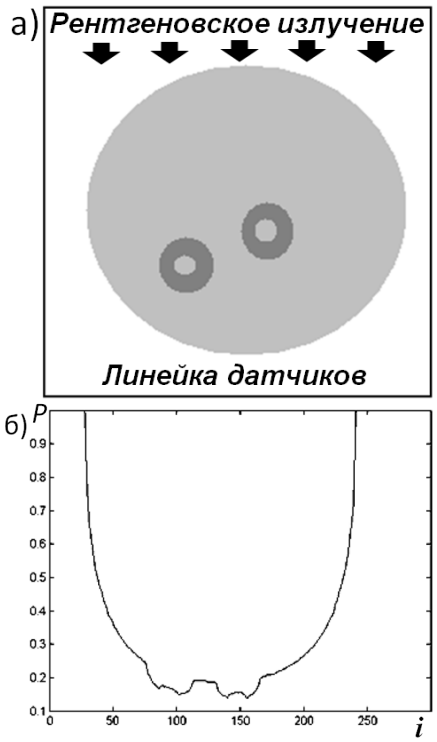


Рис. 3. Моделирование профиля яркости цифрового снимка в одной строке матрицы: а) модель сечения предплечья, коэффициент поглощения отображается оттенком серого; б) яркость P (в долях от входной интенсивности излучения), как функция номера пикселя i.

в данной рентгеновской системе, достаточна для оценки минеральной плотности костной ткани.

Дальнейший анализ данных проводится с учетом геометрических характеристик, полученных из анализа снимка, а также при помощи экспериментального стенда, и дает оценку объемного содержания гидроксиапатита в кости.

Выводы

Полученные результаты позволяют сделать выводы о перспективности предложенного метода для диагностики остеопороза с помощью цифровых рентгеновских аппаратов общего назначения и о необходимости создания программного обеспечения для автоматизированного анализа снимка.

Литература

[1] *Gulam M., Thornton M., Hodsman A., Holdsworth D.* Bone mineral measurement of phalanges: comparison of radiographic absorptiometry and area dual X-ray absorptiometry // Radiology, 2000, Vol. 216, Pp. 586.

[2] *Арапов Н. А., Корнев А. Н., Кулаков В. И., Никонов И. А., Санталов Б. Ф., Устинин М. Н., Фокин В. А., Яшин В. А.* Аппарат для получения компьютерных рентгеновских изображений и способ получения таких изображений // пат. № 2134450 Рос. Федерация. № 97112727/09: заявл.24.07.97; опубл.10.08.99, Бюл. № 22. — 16 с.

[3] *Устинин М. Н., Никонов И. А., Ольшевец М. М.* Цифровая диагностика и телемедицина // Компьютеры и суперкомпьютеры в биологии. Под ред. В. Д. Лахно и М. Н. Устинина. М.–Ижевск, 2002, — С. 458–475.

[4] *Ol'shevetz M. M., Ustinin M. N., Nikonov I. A.* Software for Digital Filmless Roentgenography // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2006. — Vol. 16. — Pp. 23–25.

[5] *Daubechies I.* Ten Lectures on Wavelets // Philadelphia: SIAM, 1992.

[6] *Устинин М. Н.* Спектрально-аналитические методы обработки данных вычислительного и натурного эксперимента // Дисс. д. ф.-м. н., Пущино, 2004.

Оценка состояния утомления человека-оператора на базе характеристик пульсового сигнала лучевой артерии*

Дорофеюк А. А., Гучук В. В., Десова А. А., Покровская И. В.
daa2@mail.ru
Москва, Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН

Рассмотрены особенности создания системы оценки состояния утомления человека-оператора. Разработана концепция такой системы. Обоснована необходимость использования для этой цели пульсового сигнала лучевой артерии и эффективных методов интеллектуальной обработки этого сигнала.

Human operator state of tiredness estimation based on the radial artery pulse signal characteristics*

Dorofeyuk A. A., Guchuk V. V., Desova A. A., Pokrovskya I. V.
Institute of Control Sciences named by V. A. Trapeznikov RAS, Moscow, Russia

The particular qualities of operator state of tiredness estimation system creation are considered. The system conception is developed. The necessity of radial artery pulse signal estimation, as well as the effective methods of this signal intellectual processing usage for this purpose is proved.

Надёжность и эффективность функционирования современных человеко-машинных систем во многом определяется качеством работы человека-оператора. Известно, что большое число аварий и катастроф происходит именно по вине операторов. А это во многом зависит от его состояния, в том числе от степени его утомления, эмоциональной и операционной напряженности, стрессовых воздействий. Психофизиологическое состояние человека-оператора в значительной мере определяется степенью его утомления. Утомление — процесс временного снижения функциональных возможностей организма под влиянием интенсивной или длительной работы, выражающийся в ухудшении количественных и качественных показателей работы оператора. Утомление повышает вероятность ошибочных действий и в общем случае снижают общую работоспособность оператора в целом. Очевидно, что обеспечение надёжной деятельности оператора включает различные аспекты, в том числе организацию предварительных технических и эргономических мероприятий (выполнение эргономических требований к оборудованию, проведение профотбора и обучения, организация режима труда и отдыха) и осуществление текущих мероприятий по оценке и поддержанию на должном уровне психофизиологического (функционального) состояния человека-оператора. Работа касается весьма актуальной для многих отраслей народного хозяйства проблемы оценки психофизиологического состояния человека-оператора, которое в значительной части определяется степенью его утомления.

Критерии оценки психофизиологического состояния человека-оператора

В настоящее время во всём мире общепринятым является использование двух групп критериев, в терминах которых осуществляется оценка психофизиологического состояния человека-оператора.

Первая группа включает критерии, характеризующие работоспособность оператора в заданном виде деятельности, то есть способность оператора сохранять значения регламентных характеристик деятельности. Эти критерии выражаются обычно в терминах таких показателей деятельности, как: доля действий, выполненных правильно; дисперсия ошибок; время реакции; вероятность правильного выполнения поставленных задач и т.д. Эти критерии используются, в основном, в задачах повышения надёжности и эффективности работы человеко-машинных систем управления.

Вторая группа включает критерии, характеризующие воздействие факторов труда и окружающей среды на состояние здоровья оператора. Формулируются эти критерии, как правило, в терминах вероятности заболевания человека в условиях выполнения данной деятельности. Используются эти критерии, в первую очередь, в задачах гигиены труда.

В пределах каждой из этих групп существует достаточно много узкоспециализированных критериев, определяемых спецификой конкретной прикладной задачи использования человека-оператора. Опыт ВВС США говорит о том, что проблема выбора адекватных критериев, характеризующих психофизиологическое состояние человека-оператора (в данном случае военных авиационных диспетчеров) в рамках конкретной задачи, решается

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты №№10-07-00027, 08-07-00349.

достаточно трудно, а в ряде случаев не имеет явного решения. В связи с этим наиболее адекватным подходом к формированию критериев психофизиологического состояние является подход ведущих российских специалистов в этой области — определение нескольких уровней (типов) такого состояния. Вводится тип состояния «норма» — некоторый набор значений физиологических и психофизиологических показателей, характеризующих состояние оператора, выделенных экспертным путём для индивидуального оператора или группы операторов. Остальные типы состояний определяются в зависимости от степени отклонения этих показателей от нормы.

Система оценки состояния утомления человека-оператора

Был разработан методологический подход к решению проблемы оценки состояния человека-оператора, который включает следующие три основные этапа:

1. Формирование критерия исследуемого состояния оператора (прежде всего утомления) для конкретной области его деятельности.
2. Определение набора информативных показателей, адекватно характеризующих состояние оператора.
3. Построение решающего правила для определения класса (типа) состояния оператора по оценкам значений выбранного критерия как функции от измеряемых информативных показателей.

Проведенный мониторинг исследований в области оценки психофизиологического состояния оператора позволил сделать вывод о том, что в настоящее время наиболее полную информацию для такого рода оценок содержат показатели пульсового сигнала лучевой артерии (ПСЛА) оператора. Поэтому реализация сформулированного выше методологического подхода проходит в направлении максимального использования ПСЛА.

Для решения проблемы 1 (формирование критерия) была разработана методика проведения многовариантной экспертизы среди специалистов в этой области [1]. В процессе её проведения определяются характеристики состояния «норма» для нескольких конкретных систем, где по существу используется человек-оператор.

Для решения проблемы 2 (определение набора информативных показателей) авторы используют имеющийся задел по выявлению информативных показателей из ПСЛА при решении задач медицинской диагностики [2].

Для решения проблемы 3 (построение решающего правила) используются современные схемы и процедуры распознавания образов, по применению которых в задачах медицинской диагностики у авторов также имеются положительные результаты [3].

Реализация текущего контроля состояния оператора накладывает ряд специфических требований на систему сбора и передачи информации. Прежде всего, необходимо минимизировать число и объём измерительных устройств, обеспечивающих съём физиологической информации, но при этом необходимо обеспечить сбор такого объёма физиологической информации, которое будет достаточным для получения надёжных решающих правил. Для этого требуется разработка методов анализа физиологических сигналов, обеспечивающих формирование наиболее информативного комплекса признаков, в том числе за счёт разработки и использования современных, высокоэффективных алгоритмов интеллектуального анализа информации.

В настоящее время в большинстве стран мира принят полиэффекторный метод регистрации физиологических показателей, то есть одновременное измерение большого числа различных показателей, не имеющих, как правило, сильно выраженной взаимосвязи между собой. Такой сбор информации обусловлен большой сложностью явлений протекающих в организме, наличием существенных индивидуальных различий, отсутствием специфичности реакций организма на то или иное воздействие и сильно выраженным вероятностным характером физиологических проявлений. Однако, в реальных условиях деятельности установка на операторе большого числа измерительных устройств (датчиков) затруднительна. В связи с этим нами была поставлена задача обеспечения полноты физиологической информации не за счёт увеличения числа измеряемых сигналов, а путём увеличения объема информации, извлекаемой из каждого сигнала. Это достигается путем усложнения и повышения эффективности алгоритмов анализа физиологической информации. Очевидно, что при таком подходе необходимо выбирать в качестве измеряемых те физиологические сигналы, которые отражают более широкие аспекты функционирования организма. Наши исследования в этой области показали, что наиболее перспективным для такого типа задач является пульсовой сигнал лучевой артерии. Принципиально важным фактором является информационная насыщенность пульсограммы, окоторая отражает не только психофизиологическое состояние оператора, но и состояние его здоровья в целом.

Важнейшая составляющая рассматриваемой проблемы, в значительно степени определяющая эффективность системы в целом, — это разработка и техническая реализация надёжной, помехоустойчивой телеметрической подсистемы сбора и передачи физиологической информации с датчи-

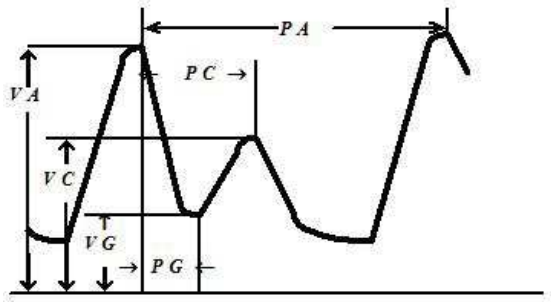


Рис. 1. Квазипериод ПСЛА.

ков, устанавливаемых на операторе. В настоящее время на базе ранее разработанной портативной компьютерной системы регистрации, обработки и хранения пульсовых сигналов [4] реализуется система следующего поколения на новейшей электронной базе и современной беспроводной телеметрической подсистеме.

Выбор информативных показателей ПСЛА для оценки состояния оператора

Форма пульсового сигнала лучевой артерии в пределах основного квазипериода схематически представлена на рис. 1. Здесь введены следующие обозначения: PA — период пульсовой волны; PC — время достижения максимума дикротической волны; PG — время падения основной (систолической) волны; VA, VC, VG — амплитудные характеристики систолической и дикротической волн [5]. Информация о пульсовом сигнале, может быть представлена в двух видах — значения параметров формы пульсовой волны; а также информация, отражающая динамические изменения элементов формы пульсовой волны и тем самым характеризующая ритмическую структуру сигнала в целом. Автоматизированные методы анализа пульсового сигнала должны предусматривать обработку обоих видов информации.

Методика анализа ритмической структуры пульсового сигнала с целью выделения информативных характеристик предусматривает идентификацию значимых элементов в пределах его основного квазипериода. Методика состоит из следующих этапов:

— автоматизированное выделение характерных элементов пульсового сигнала в пределах основного квазипериода (см. рис. 1), а также вычисление амплитудных и временных параметров этих элементов;
— формирование динамических рядов амплитудных и временных параметров характерных элементов, каждый из которых представляет собой зависимость значений данного параметра от номера периода;
— вычисление статистических характеристик этих динамических рядов;
— вычисление спектральной плотности всех сформированных динамических рядов и оценка взаимных соотношений колебательных компонент.

Основной целью в задаче оценки состояния человека-оператора является построение дискриминантных решающих правил, отделяющих норму от других типов (классов) его состояния. Поэтому на базе полученных характеристик производится оценка степени их информативности для исследуемой задачи и формируется соо-ветствующее пространство информативных признаков. Именно в этом пространстве производится построение решающих правил с использованием алгоритмов классификационного анализа данных и распознавания образов [6].

Выделение функционально-значимых элементов пульсового сигнала. Начальным этапом выделения функционально-значимых элементов сигнала является разбиение пульсового сигнала на квазипериоды. Сложность задачи автоматического выделения отдельных квазипериодов обусловлена значительной вариабельностью форм сигнала, наличием артефактов, наличием локальных экстремумов и т.п. В качестве базовых параметров исходного сигнала используются амплитудные (VA, VC, VG) и временные (PA, PC, PG) параметры характерных элементов единичного квазипериода (рис 1).

Для автоматического выделения основной и дополнительных волн единичного квазипериода был разработан специальный алгоритм [2], базирующийся на методах классификационного анализа данных [1]. Схему работы этого алгоритма поясним на примере выделения основного квазипериода PA. На анализируемой записи сигнала выделяются все максимумы, то есть формируется выборка значений амплитуд типа VA и VC для всего сигнала. Затем с помощью одномерного варианта алгоритма m-локальной оптимизации [7] строится оптимальная классификация этой выборки на 3–5 классов (обычно на 3 класса — малые, средние и большие значения амплитуды). Самый правый на оси значений класс (большие значения амплитуды) и будет соответствовать максимумам основного квазипериода для большей части сигнала.

Далее по стандартной схеме на реализации сигнала выделяются максимумы, попавшие в крайне правый класс, тогда отрезки сигнала между смежными выделенными максимумами и являются претендентами на искомые квазипериоды. К сожалению, на реальных пульсограммах часто наблюдаются существенные колебания значений амплитуд основных квазипериодов.

В связи с этим далее анализируется распределение выявленных зубцов на временной шкале. Если расстояние между соседними зубцами более $T_c K_a$, где T_c — средняя (типичная) длительность периода, а K_a — коэффициент аритмии $(1{,}5 \div 2{,}5)$, то для этой непериодизированной области выполняется коррекция. Процедура коррекции организована итеративным путем. А именно, в непериодизированной области ищется зубец с максимальной амплитудой и его включают в перечень основных зубцов. Затем вновь анализируется распределение зубцов на временной шкале и т. д. Остаётся проблема, связанная с неопределенностью коэффициента аритмии K_a. Впрочем, как показали тесты, влияние выбора величины этого коэффициента на качестве периодизации сказывается лишь в экзотических случаях. По аналогичной схеме находятся другие периодические составляющие сигнала в рамках основного квазипериода (в общем случае анализируются распределения не только максимумов, но и минимумов).

В процессе автоматического выделения основных и дополнительных волн осуществляется оценка их амплитудных и временных значений. Затем полученные значения базовых параметров используются для формирования динамических рядов, представляющих собой зависимость значений каждого параметра от номера периода.

Спектральный анализ колебательных компонент динамических рядов. Динамические ряды, полученные на предыдущем этапе, рассматриваются как квазистационарные случайные процессы, представляющие собой суперпозицию колебаний, трендов и шумов. Выявление периодических составляющих динамических рядов осуществляется с помощью спектрально-корреляционного анализа, прежде всего с помощью анализа функции спектральной плотности. Пики спектральной плотности, как правило, сосредоточены в частотных диапазонах HF (0,15–0,4 Гц), LF (0,04–0,15 Гц), VLF (0,003–0,04 Гц).

На исследуемом массиве данных (более 300 векторов) экспертным путём было выделено 7 типов спектральной плотности, отличающихся количеством и степенью выраженности указанных выше колебательных компонент. Аналогичные типы спектральной плотности были выделены и для динамических рядов других базовых параметров пульсового сигнала.

Для получения объективных данных о типах спектральной плотности была проведена формализованная (автоматическая) классификация спектральных кривых в пространстве следующих синтетических параметров: VLF/LF, LF/HF и HF/VLF. Для этой цели использовался комплексный алгоритм автоматической классификации [7]. Сравнительный анализ экспертной и формализованной классификаций показал их достаточно высокую согласованность. Этот важный результат позволяет в дальнейшем в значительной степени автоматизировать процесс построения дискриминантных решающих правил. Было построено трёхмерное распределение указанных параметров для различных типов спектров. Это позволило выявить ориентировочные области расположения различных типов спектральной плотности в координатах рассматриваемых параметров.

В настоящее время проводятся работы по сбору массива данных одного из вариантов работы человека-оператора в экспериментальных условиях с регулируемой нагрузкой и сложностью. На базе этого массива будут уточнены критерии оценки состояния оператора, ранее полученные экспертным путём.

Литература

[1] *Дорофеюк А. А., Покровская И. В., Черняв-ский А. Л.* Методология коллективной многовариантной экспертизы в задачах анализа и совершенствования крупномасштабных систем управления // Управление развитием крупномасштабных систем (MLSD'2009): Материалы Третьей международной конференции.— Т. 1— М.: ИПУ РАН — 2009. — С. 178–180.

[2] *Десова А. А., Дорофеюк А. А., Гучук В.В., Дорофеюк Ю. А., Покровская И. В.* Процедуры классификационного анализа в задаче формирования информативных признаков при исследовании ритмической структуры биосигнала // Автоматика и телемеханика. — 2008. — № 6.— С. 143–152.

[3] *Дорофеюк А. А., Гучук В. В., Десова А. А., Дорофеюк Ю. А., Покровская И. В.* Классификационный анализ характеристик пульсового сигнала в задачах диагностики сердечно-сосудистых заболеваний // Таврический вестник информатики и математики. — 2008. — № 1. — С. 152–158.

[4] *А. А. Десова, А. А. Дорофеюк, Д.Ю. Максимов* Портативная компьютерная система регистрации, обработки и хранения пульсовых сигналов. // Датчики и системы. — 2008. — № 4.— С. 29–34.

[5] *Десова А. А., Кизева А. Г.* Исследование характеристик формы и ритмической структуры пульсового сигнала лучевой артерии при артериальной гипертензии в детском и подростковом возрасте // Физиология человека. — 2007. — Т. 23 — № 3. — С. 38–43.

[6] *Бауман Е. В., Дорофеюк А. А.* Классификационный анализ данных // «Избранные труды Международной конференции по проблемам управления. Том 1», Москва: СИНТЕГ. — 1999.

[7] *Дорофеюк Ю. А.* Комплексный алгоритм автоматической классификации и его использование в задачах анализа и принятия решений // Таврический вестник информатики и математики. — 2008. — № 1. — С. 171–177.

Подход к ангиографической диагностике с помощью вычисления оптического потока*

Марьяскин Е. Л., Ивановский С. А., Немирко А. П.
e.maryaskin@gmail.com, saivanovsky@mail.ru, apn-bs@yandex.ru
Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский Государственный Электротехнический Университет «ЛЭТИ»

Данная статья рассматривает возможности применения метода оптического потока к обработке изображений ангиографических данных. Предлагаются реализованные программно способы решения стандартных диагностических задач, что позволяет визуально оценить их эффективность на различных реальных примерах ангиографической диагностики. В конце описываются дополнительные методы исследования на основе вычисления оптического потока, делается вывод об эффективности такого подхода.

An approach to the angiography diagnostics based on optical flow calculation*

Maryaskin E. L., Ivanovsky S. A., Nemirko A. P.
Saint-Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint-Petersburg, Russian Federation

This article is devoted to the possibility of using the optical flow method in the arteriography data images processing. Different methods of resolving the standard diagnostics issues are proposed. All proposed methods are software realized. This makes it possible to estimate their efficiency in the real angiography diagnostics images sequences. Different additional research methods based on the optical flow calculation are described. A conclusion about the method efficiency is drawn in the end.

Ангиография — метод контрастного рентгенологического исследования кровеносных сосудов. Применяется в рентгенографии, рентгеноскопии, компьютерной томографии. Ангиография изучает функциональное состояние сосудов, окольного кровотока и протяженность патологического процесса.

Исследование проводится путем пункции сосуда с последующей катетеризацией. Чаще всего проводят катетеризацию бедренной артерии. Все действия внутри сосуда осуществляются под контролем рентгенотелевидения.

Понятие оптического потока

Движение и изменение уровней яркости не эквивалентны. В связи с этим представляют важность два термина: поле движения и оптический поток [1]. Поле движения в изображении — это действительное движение объекта в 3-D сцене, спроектированное на плоскость изображения. Оптический поток определяется как «поток» уровней яркости на плоскости изображений.

Даже простое вычисление оптического потока без последующей обработки позволяет провести сегментацию, определив движущиеся части, которые вообще никак не выделяются на исходном изображении [2]. На рис. 1 справа показаны движущиеся части ангиографического изображения, которые незаметны на исходном (левом) кадре.

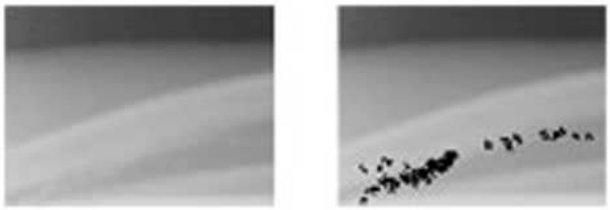


Рис. 1. Пример вычисления оптического потока.

Принцип вычисления оптического потока

Существует уравнение оптического потока:

$$\frac{\delta g}{\delta t} + f^T \nabla g = 0. \qquad (1)$$

Решением этого уравнения для пары кадров оказывается построенное в кадре векторное поле четырехмерных элементов: двух координат, скорости и направления смещения точки [1]. Для решения такого уравнения приходится накладывать некоторые дополнительные ограничения. Например, пусть смещение будет одинаковым для всех точек некоторой небольшой окрестности. Формируется переопределенная система уравнений, решением которой является вектор оптического потока [4].

Вычислительные модификации вычисления потока

Исследования показали, что уже на этапе вычисления оптического потока возможно внести алгоритмические модификации, которые помогут ускорить процесс вычисления без существенной потери информации. Было разработано специальное

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №09-01-00501-а и проект №10-01-09247-моб_з.

программное средство, предназначенное для быстрого вычисления потока и демонстрации его структуры. Вычисление векторного поля потока производится на основе метода Лукаса–Канаде и содержит следующие особенности:

— Вектора вычисляются отдельно в каждой точке, причем ни одно вычисление не производится дважды. Это обозначает, во-первых, возможность вычисления векторов оптического потока только в тех точках, которые необходимы, а во-вторых, предоставляет возможность параллельного вычисления векторного поля;

— Направление, задаваемое вектором вычисляется не абсолютно, а с точностью до $\frac{\pi}{4}$, что, во-первых, может быть сделано очень быстро, во-вторых, не снижает точность, поскольку для каждой точки изображения такой вектор задает соседнюю точку, к которой она движется, а в-третьих значительно облегчает постобработку потока и классификацию векторов потока.

В итоге работы вычислительных алгоритмов оказывается возможным как отсмотреть картину направлений движения в картинной плоскости в целом, так и просматривать увеличенными некоторые участки изображения, изучая превалирующие направления в поле скоростей. См. рис. 2

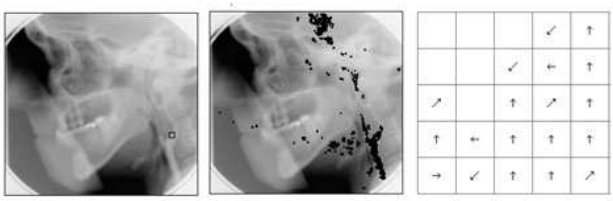


Рис. 2. Общее и детализированное представление потока.

Традиционный метод вычисления векторов оптического потока имеет один существенный недостаток. Поскольку способ вычисления тесно связан с размером рассматриваемой окрестности, оказывается невозможным корректное вычисление векторов с нормой, превосходящей размер окрестности. То есть оценка скорости быстро движущихся точек окажется заведомо некорректной [3]. На рис. 3 показана модель, позволяющая эффективно решать данную проблему. Данная мультимасштабная схема известна как пирамида Лапласа/Гаусса. Здесь исходная картинная плоскость лежит в основании пирамиды. При подъеме по пирамиде каждая точка сечения следующего уровня получается из нескольких точек сечения предыдущего, таким образом если будут обнаружены слишком большие нормы векторов — необходимо подняться уровнем выше по пирамиде, вычислить поток для новой картинной

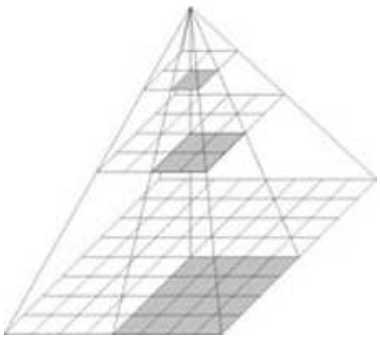


Рис. 3. Пирамида представления масштаба (Лапласа/Гаусса).

плоскости и обобщить полученный вектор потока для точек исходной плоскости. Применяя такой подход к вычислению векторов оптического потока, удается добиваться гораздо более точной оценки поля скоростей в картинной плоскости.

Фильтрация

Обычно методики обработки динамических изображений сводятся к выделению оптического потока и дальнейшему выбору точек, которые будут интерпретированы как движущиеся [1]. Однако этот выбор сводится к простой пороговой фильтрации, то есть точка картинной плоскости будет интерпретирована как изображение точки движущегося объекта, если вычисленный в ней вектор оптического потока будет иметь норму большую некоторого, заранее заданного значения. Выбор порогового значения оказывает большое влияние на дальнейшую обработку, однако сам по себе несложен хоть и зависит от конкретной задачи [5]. После чего проводится пороговая фильтрация, и оставшиеся после нее точки интерпретируются как движущиеся.

Проведенное вычисление поля векторов оптического потока, однако, оставляет достаточно большое количество векторов, определенных некорректно. В основном это связано как с погрешностью используемой для получения входной последовательности кадров аппаратурой, так и с объектом исследования. Разумеется, при любом эксперименте невозможно совсем избежать случайных микродвижений и подрагиваний исследуемого человека, что приводит к вычислению оценочных векторов скорости не только кровотока, но и этих движений.

Для уменьшения влияния этих факторов используются алгоритмы фильтрации потоковых данных. Все подобные алгоритмы похожи на стандартные алгоритмы фильтрации статических изображений [5]. Для обработки ангиографических данных в представленной работе было выбрано и реализовано два метода фильтрации.

Первый фильтр работает следующим образом: для каждой движущейся точки вычисляется количество ее прямых соседей, также интерпретированных как движущиеся. Исходная точка сохраняется, если это количество достигает параметра фильтра. Пример работы фильтра на реальных данных показан на рис. 4, где слева изображение до применения фильтра, а справа — после.

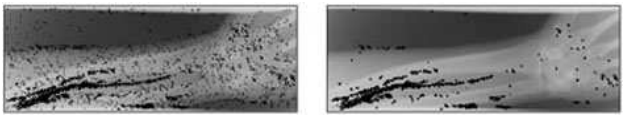


Рис. 4. Работа фильтра №1.

Работа второго фильтра основана на анализе связанных областей движущихся точек. Из массива данных отбрасываются все такие связанные группы, площадь которых не превышает параметра фильтра. Пример работы показан на рис. 5.

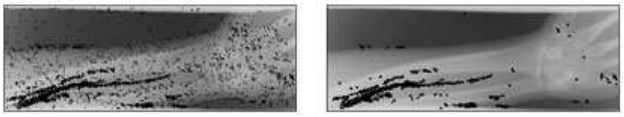


Рис. 5. Работа фильтра №2.

В результате комбинирования данных фильтров удается эффективно избавиться от шумовых векторов потока. Можно заметить, что граница движущихся точек оказывается рваной, но никакие сглаживающие фильтры в данной задаче не применимы, поскольку конкретные форма, состояние и деформация сосудов и есть одни из основных предметов ангиографического исследования.

Диагностические задачи

Ангиографическое исследование направлено на решение многих диагностических задач и, как показывает исследование, вычисленные и отфильтрованные векторы потока позволяют эффективно решать некоторые из них, поскольку оперируют реальным движением точек плоскости, происходившим в момент съемки.

Рассмотрим задачу воссоздания процесса циркуляции крови. Знание о направлениях потока и времени съемки позволяют с высокой точностью определить порядок и продолжительность прохождения кровью тех или иных участков кровеносной системы, установив последовательность для выявления нарушений в ее работе. Последовательный анализ пар кадров видеоряда воссоздает процесс кровотока, показывая, на каких участках и в какую сторону происходило движение крови за временной интервал между данными кадрами. Пример результатов такого исследования показан на рис. 6.

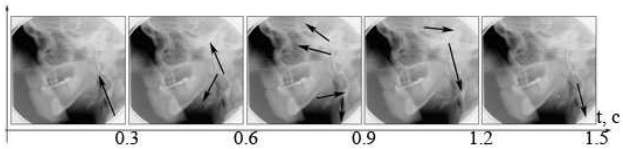


Рис. 6. График движения крови.

Такое наглядное, разложенное по временной шкале представление процесса циркуляции крови позволяет делать диагностические выводы, основанные на сравнении представленных и модельных данных кровообращения.

Другая важная задача ангиографической диагностики, которая может быть решена посредством анализа данных оптических потоков — это воссоздание целостной схемы циркуляции крови в исследуемой области. Для получения такого результата необходимо накопить потоковые данные за продолжительный период съемки и объединить последовательные участки, в которых обнаружено движение, с тем, чтобы получить общую схему. На рис. 7 показан результат подобной обработки.

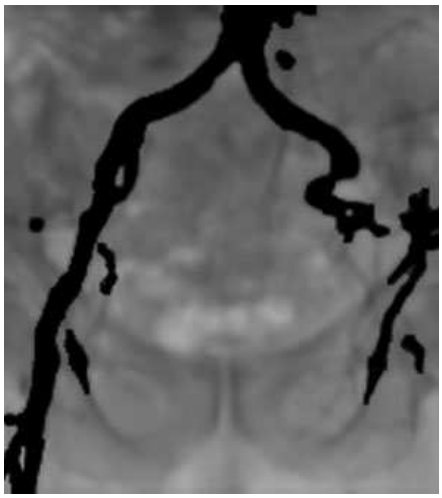


Рис. 7. Полная схема кровообращения.

Это пример интересен еще и с точки зрения оценки качества фильтрации, поскольку представленный кадр является частью диагностического исследования грудной клетки, которая находится в постоянном движении в силу процесса дыхания, что приводит к резкому увеличению нецелевых (не связанных с движением крови) векторов потока.

Кроме того, поскольку поле потока дает возможность оценивать не только факт движения точек картинной плоскости, но и направление, с помощью просто доработки оказывается возможным исследовать общее направление движения крови и разделять на изображении артериальный и ве-

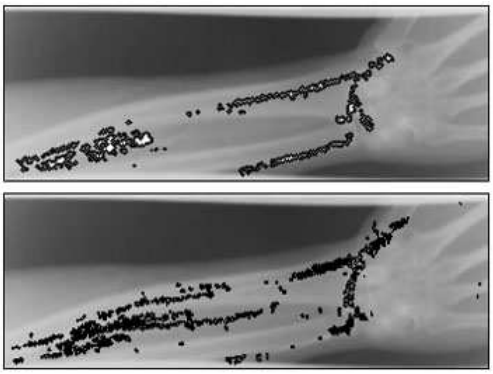


Рис. 8. Схемы артериального и венозного кровотоков.

нозный кровоток, получая более подробную информацию об исследуемых сосудах.

На рис. 8 показаны сверху-внизу схема артериального кровотока и схема венозного кровотока, полученные на основании одной и той же записи ангиографического исследования.

Локальные диагностические задачи

Эксперименты показывают, что интерактивное участие эксперта-диагноста может позволить наряду с уже описанными задачами решать и более локальные, привязанные к некоторым областям интереса, выделенным на изображении с помощью специалиста. О повреждении сосуда кроме прямых визуальных данных могут свидетельствовать также сведения о том, как именно по нему проходит кровь.

Например, при указании фрагмента сосуда, можно определить конкретную траекторию движения крови, и, сравнив ее с формой сосуда, обнаружить отклонения, препятствующие кровотоку в этом месте.

Другой пример относится к диагностики самих сосудов, при указании конкретного интересующего сечения, оказывается просто определить площадь сечения сосуда в этом месте в зависимости от времени и, построив график, оценить степень эластичности стенок и наличие в них повреждений.

Кроме того, используя информацию о номере исследуемого кадра и направлении векторов оптического потока, оказывается возможным оценить роль выбранного целевого участка в схеме кровообращения, наблюдаемой в ходе исследования, и проверить эффективность функционирования той или иной ее части.

Заключение

В проделанной работе были исследованы и разработаны новые походы к решению задач медицинской ангиографической диагностики, основанные на динамической сегментации данных, использующей вычисление оптического потока.

Описаны способы алгоритмической модификации вычисления оптического потока, показавшие свою практическую эффективность в области поставленных задач. Предложены пути решения задач ангиографической диагностики, намечены перспективы развития метода динамической сегментации в отношении медицинских изображений. Исследование проведено на реальных примерах данных ангиографии различных органов, полученных с помощью специализированных медицинских приборов.

Литература

[1] *Яне Б.* Цифровая обработка изображений. — Техносфера, 2007.

[2] *Шапиро Л., Стокман Дж.* Компьютерное зрение. — БИНОМ. Лаборатория Знаний, 2006.

[3] *Ballard D., Brown C.* Computer vision. — Department of computer science. University of Rochester. Rochester, New York, 2006.

[4] *Backer S., Matthews I.* Lucas-Kanade 20 Years On: A Unifying Framework // The Robotics Institute Carnegie Mellon University Pittsburgh, PA 15213. To Appear in the International Journal of Computer Vision, 2001.

[5] *Horn B. K.* Robot vision. — Cambridge, MA: MIT Press, 1986.

Использование показателей энтропии ЭЭГ-сигнала для распознавания стадий наркоза*

Немирко А. П., Манило Л. А., Калиниченко А. Н., Волкова С. С.
apn-bs@yandex.ru
Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

Исследуются возможности применения информационных характеристик сигнала, основанных на вычислении условной энтропии Шеннона, приближенной оценки энтропии Колмогорова (аппроксимированной энтропии), спектральной энтропии для автоматического анализа ЭЭГ пациента при проведении хирургических операций. Предложен ряд параметров энтропии, позволяющих оценить степень регулярности анализируемых фрагментов ЭЭГ. Проведен сравнительный анализ эффективности основных индексов энтропии при распознавании стадии глубокого наркоза. Показано, что ряд параметров, вычисляемых во временной и частотной областях, может быть использован для контроля глубины наркоза по ЭЭГ.

Use of EEG-signal entropy indices for anesthesia depth estimation*

Nemirko A. P., Manilo L. A., Kalinichenko A. N., Volkova S. S.
Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", St. Petersburg, Russia

Possibilities of EEG signal information characteristics use for the task of anesthesia depth estimation in the course of surgical operation are considered. The following methods are considered: Shannon conditional entropy, Kolmogorov entropy approximate estimation (approximated entropy), spectral entropy. A number of entropy based indexes are proposed for the estimation of EEG signal regularity. A comparative analysis of these indexes from the point of view of deep anesthesia stage recognition was implemented. It was shown that some of the examined parameters calculated both in time and frequency domain can be successfully used for the automated anesthesia depth monitoring.

Надежное распознавание стадий наркоза в ходе проведения хирургических операций является одним из важнейших условий эффективного управления процессом анестезии. Адекватная оценка уровня функциональной активности головного мозга обеспечивает возможность выбора такого режима ввода анестетиков, который поддерживает необходимую глубину наркоза и безопасен для пациента. Исследования последних лет в этой области направлены на создание методов и аппаратуры непрерывного контроля состояния пациента, способствующих получению объективных критериев текущего уровня активности головного мозга.

В основе технологии мониторинга состояния головного мозга лежит автоматический анализ электроэнцефалограммы (ЭЭГ), снимаемой с помощью электродов, расположенных на поверхности головы. Этот сложный физиологический сигнал отражает электрическую активность коры головного мозга. Доказано, что ЭЭГ изменяется в ответ на воздействие седативных препаратов или средств для наркоза [1]. Высокий уровень функциональной активности мозга проявляется десинхронизацией в суммарной электрической активности. Снижение уровня функциональной активности, наоборот, сопровождается синхронизированной работой отдельных популяций нейронов и отражается на ЭЭГ регулярными высокоамплитудными, но медленными колебаниями.

Так как степень регулярности последовательности дискретных отсчетов ЭЭГ находится в прямой зависимости от текущего уровня активности головного мозга, то перспективными являются методы анализа ЭЭГ, основанные на вычислении информационных характеристик, в частности, энтропийных параметров сигнала [2].

Методы вычисления энтропийных показателей глубины анестезии

Энтропия ЭЭГ — это нелинейный статистический параметр, описывающий степень хаотичности ЭЭГ данных [3]. Для такого подхода ЭЭГ является не суммой синусоидальных колебаний, а результатом деятельности нелинейной системы. Энтропия пропорциональна логарифму числа состояний динамических систем и таким образом связана с оценкой беспорядка (хаотичности) в системе. Поэтому энтропия описывает беспорядочность (неорганизованность), т. е. сложность сигнала, и является характеристикой его непредсказуемости.

Существует несколько способов вычисления энтропии сигнала [3]. Во временной области вычисляются аппроксимированная энтропия и энтропия Шеннона [3, 4, 5]. В частотной области рассчитывается спектральная энтропия [3, 6, 7].

В клинической практике при распознавании стадий наркоза удобно использовать так называемый индекс энтропии (ИЭ). Это число на шкале от 0 до 100, соотносящееся с конкретными клини-

Работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (госконтракт от 10.03.09 г. № 02.522.11.2020) и РФФИ, проекты № 09-01-00501 и № 10-01-00604.

ческими состояниями, наблюдаемыми у пациентов в период действия анестетика. Индекс энтропии, близкий к 100, означает бодрствование, а 0 указывает на полное отсутствие мозговой активности.

Вопрос выбора энтропийной характеристики, по которой может быть определен индекс энтропии, до настоящего времени остается дискуссионным. Не найден способ оценки параметров ЭЭГ сигнала, обеспечивающий абсолютно надежное распознавание стадий наркоза. Поэтому в данной работе предпринята попытка провести сравнительный анализ индексов энтропии, получаемых по разным оценкам степени регулярности ЭЭГ сигнала. Исследованы характеристики энтропии, вычисляемой как во временной, так и в частотной области анализа.

В первую очередь рассмотрены две оценки энтропии во временной области: условная энтропия Шеннона и аппроксимированная энтропия [4, 5].

Величина условной энтропии Шеннона $E(L\,|\,L-1)$ определяется в виде приращения, получаемого безусловной энтропией $E(L)$ при переходе от последовательности событий длины $(L-1)$ к длине L:

$$E(L\,|\,L-1) = E(L) - E(L-1) = \\ = -\sum_{L} p_L \log p_L + \sum_{L-1} p_{L-1} \log p_{L-1}, \qquad (1)$$

где p_L — вероятность (частота) появления конкретной цепочки событий длины L.

Последовательность событий формируется по интервальным оценкам сигнала $\{x(i)\}$, $i = 1, \ldots, N$, задаваемым числом уровней квантования ξ в диапазоне $[x_{\min}, x_{\max}]$. Отсюда следует, что ячейки L-мерного пространства состояний задаются жесткой сеткой с шагом $\Delta = (x_{\max} - x_{\min})/\xi$.

Аппроксимированная энтропия в отличие от энтропии Шеннона реализует адаптивный механизм формирования ячеек фазового пространства и вычисляется как приближенная оценка энтропии Колмогорова:

$$\mathrm{ApEn}(m) = \left[\theta^m(r) - \theta^{m+1}(r)\right]; \qquad (2)$$

$$\theta^m(r) = \frac{1}{N-m+1} \sum_{i=1}^{N-m+1} \ln C_r^m(i),$$

где m — длина анализируемых последовательностей отсчетов сигнала, r — величина порога, определяющего размеры ячеек фазового пространства, $C_r^m(i)$ определяется числом пар цепочек длины m, расстояние между которыми меньше r [5].

Точечные оценки (1) и (2) принимают минимальные значения для абсолютно детерминированного сигнала и максимальны в случае хаотического сигнала. Однако при анализе выборки отсчетов размером N с ростом длины L (или m) повышается вероятность появления одиночных цепочек. Это приводит к появлению эффекта ложной регулярности сигнала, т. к. приращение энтропии для одиночных цепочек равно нулю. В работах [4, 5] предложены способы коррекции оценок (1), (2), исключающие из рассмотрения цепочки, являющиеся по своей природе неизвестными. Это позволяет оценивать ряд интегральных параметров, вычисляемых для последовательности точечных оценок $E(L\,|\,L-1)$ и $\mathrm{ApEn}(m)$.

В данной работе исследовались следующие показатели энтропии сигнала, оцениваемые во временной области:

1) $E(3\,|\,2)$ — значение условной энтропии Шеннона при $L = 3$, т. е. в той области значений L, где вклад одиночных цепочек незначителен;
2) minCE — относительный минимум скорректированной энтропии Шеннона (Corrected Entropy);
3) $\mathrm{ApEn}(2)$ — значение аппроксимированной энтропии при $m = 2$;
4) minCApEn — относительный минимум скорректированной аппроксимированной энтропии (Corrected Approximate Entropy).

Для приведения этих показателей к шкале индексов $(0, \ldots, 100)$ были предложены их нормированные оценки. Индексы энтропии Шеннона получены нормировкой по $E(1\,|\,0)$, а для аппроксимированной энтропии — по $\mathrm{ApEn}(0)$. Нормирующие величины равны абсолютной энтропии для одиночных событий и имеют максимальное значение в ряду точечных оценок каждой их условных энтропий.

Кроме показателей энтропии сигнала во временной области были рассмотрены индексы спектральной энтропии (СЭ). Исходным описанием для расчёта спектральной энтропии является спектр сигнала, который может быть вычислен с использованием быстрого преобразования Фурье (БПФ). Для получения более устойчивых спектральных оценок в рамках данной работы применялось усреднение полученного на основе алгоритма БПФ спектра, а также оценка спектральной плотности мощности (СПМ) методом авторегрессии скользящего среднего (АРСС). Выборка спектральных компонент вначале преобразуется с помощью функции Шеннона, а затем вычисляется их сумма, которая и дает значение СЭ. В процессе вычисления производится нормализация спектра и показателя СЭ, благодаря чему полученная величина ранжируется в пределах от 0 (полная регулярность) до 100 (максимальная нерегулярность).

Далее рассчитываются два энтропийных индикатора: один (энтропия состояния, SE) по диапазону доминирующих частот ЭЭГ (от 0,8 Гц до 32 Гц), а другой (энтропия отклика, RE) — по всему диапазону частот, включающему как ком-

поненты ЭЭГ, так и компоненты электромиограммы (ЭМГ) (от 0,8 Гц до 47 Гц). Идея применения двух показателей заключается в том, что каждый из них несет важную информацию о степени активности головного мозга пациента. Показатель SE дает оценку его текущего состояния, при этом кратковременные колебания исключаются из обработки. Показатель RE реагирует на ЭМГ-активность, а значит, является косвенной оценкой адекватности анальгезии, поскольку ЭМГ-активность может увеличиваться в результате снижения степени анестезии. В данной работе исследование проведено отдельно для каждого из показателей SE и RE.

Анализ эффективности энтропийных критериев при распознавании стадии глубокого наркоза

Все исследования проведены на выборке данных, включающей 124 5-секундных записей ЭЭГ. Такой размер фрагмента сигнала выбран с учетом обеспечения требуемой устойчивости спектральных оценок сигнала, с одной стороны, и достаточной скорости обновления индекса глубины наркоза, с другой. Для каждого пациента анализировались два состояния: бодрствование и глубокий наркоз.

В качестве показателя эффективности методов анализа ЭЭГ выбран критерий Фишера J, который принимает максимальное значение в условиях наилучшей классификации двух состояний [4] и определяется как:

$$J_{1,2} = \frac{|m_1 - m_2|^2}{\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2},$$

где m_1 и m_2 — средние значения вычисляемого параметра энтропии для состояний бодрствования и наркоза соответственно; $\tilde{s}_i^2 = \sum (y - m_i)^2$ — величина разброса для спроецированных на ось решений выборок y; $\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2$ — полный разброс внутри классов.

В ходе предварительных экспериментов установлено, что значения оценок энтропии, рассчитываемых во временной области, зависят от двух параметров: ξ — для энтропии Шеннона, r — для аппроксимированной энтропии. Анализ зависимостей коэффициента J от ξ и r для исследуемых методов позволил выбрать значения $\xi = 8$ и $r = 0{,}1$, обеспечивающие наибольшие значения критерия эффективности. Коэффициент r задает размер ячеек фазового пространства для ApEn(m), определяемый в виде $R = r \cdot \mathrm{SD}_x$, $r = 0{,}05, \ldots, 0{,}3$, где SD_x — стандартное отклонение исходной выборки данных. Полученные значения коэффициента J при $\xi = 8$ и $r = 0{,}1$ представлены в таблице 1.

Критерии эффективности для оценок СЭ оказались значительно ниже. С целью повышения качества спектральных оценок было предложено два направления исследований: поиск наилучшего метода вычисления СПМ сигнала и повышение нижней граничной частоты при определении показателей SE и RE. Эти показатели рассчитывались в следующих частотных диапазонах: SE — от f_1 до 32 Гц, RE — от f_1 до 47 Гц, где $f_1 = 3, \ldots, 10$ Гц. Рассматривались следующие способы отыскания СПМ:

1) быстрое преобразование Фурье (БПФ);
2) расчет СПМ по методу Уэлча;
3) метод авторегрессии и скользящего среднего (АРСС).

Полученные значения коэффициента J для СЭ представлены в таблице 2.

Как следует из анализа данных, приведенных в таблицах 1 и 2, наилучшее разделение состояний наркоза и бодрствования обеспечивает применение метода АРСС при $f_1 = 6, \ldots, 8$ Гц. Однако это связано с исключением из анализа низкочастотной составляющей спектра ЭЭГ (0,8–5 Гц). Во временной области наибольшее значение показателя J получено для оценки ApEn(2)/ApEn(0).

Помимо J оценкой качества распознавания стадий наркоза может служить величина среднего рассеяния (СР) анализируемого показателя, оцениваемого для каждого пациента в двух состояниях (бодрствование — наркоз), относительно идеальной точки, задаваемой координатами $(100, 0)$, где 0 — значение оцениваемого показателя при глубоком наркозе, 100 — в состоянии бодрствования. В качестве меры разброса используется евклидово расстояние от i-го объекта до идеальной точки.

Таблица 1. Значение J для параметров энтропии, вычисляемых во временной области.

Параметр энтропии	Значение J
$E(3\,|\,2)/E(1\,|\,0)$	2,85
minCE/$E(1\,|\,0)$	3,78
ApEn(2)/ApEn(0)	4,07
minCApEn/ApEn(0)	3,74

Таблица 2. Значение J для показателей спектральной энтропии.

f_1, Гц	Способ вычисления СПМ					
	БПФ		м. Уэлча		АРСС	
	SE	RE	SE	RE	SE	RE
3	0,35	1,54	0,27	1,19	0,39	1,52
4	0,71	2,56	0,70	2,42	0,80	2,53
5	1,05	3,24	1,23	3,49	1,39	3,66
6	1,08	3,17	1,57	3,98	2,27	5,10
7	1,40	3,81	2,15	4,63	3,02	6,21
8	1,46	3,98	2,70	5,59	3,75	6,67
9	1,54	3,93	2,74	5,42	3,84	6,82
10	1,75	4,12	2,86	5,38	4,02	6,70

Таблица 3. Значение среднего рассеяния (СР) для временных индексов энтропии.

Мет. оц. энтроп.	$\frac{E(3\,\vert\,2)}{E(1\,\vert\,0)}$	$\frac{\text{minCE}}{E(1\,\vert\,0)}$	$\frac{\text{ApEn}(2)}{\text{ApEn}(0)}$	$\frac{\text{minCApEn}}{\text{ApEn}(0)}$
СР	56,8	57,7	60,0	49,7

Таблица 4. Значение среднего рассеяния (СР) для спектральных индексов энтропии.

Мет. оц. энтроп.	СЭ, БПФ		СЭ, Уэлч		СЭ, АРСС	
Индекс	SE	RE	SE	RE	SE	RE
СР	81,2	76,1	87,1	81,1	88,5	82,2

Значения СР для исследуемых энтропийных показателей приведены в таблицах 3 и 4. Наилучшие результаты в данном исследовании получены для минимума скорректированной оценки аппроксимированной энтропии, в то время как спектральные методы наиболее далеки от «идеальной точки». На рис. 1 приведены примеры распределения двух индексов энтропии для методов, основанных на точечной оценке аппроксимированной и спектральной энтропии. Гистограмма с заполнением точками соответствует распределению для состоянии бодрствования, без заполнения — при наркозе.

Выводы

Как видно из рисунка, спектральные методы не обеспечивают надежного разделения двух состояний ввиду малого разброса средних значений показателя RE. Однако диапазон изменений СЭ может быть скорректирован с помощью нелинейной шкалы преобразования. В то же время ИЭ, полученный с использованием аппроксимированной энтропии, отличает бóльшая величина разброса между классами состояний. Это позволяет сделать вывод о более надежной оценке энтропии во временной области, поскольку чувствительность метода распознавания состояний к малым изменениям оцениваемых показателей не столь велика. Дальнейшие исследования должны быть направлены на уточнение оценок энтропийных параметров, используемых для распознавания стадий наркоза, и совместное использование нескольких показателей.

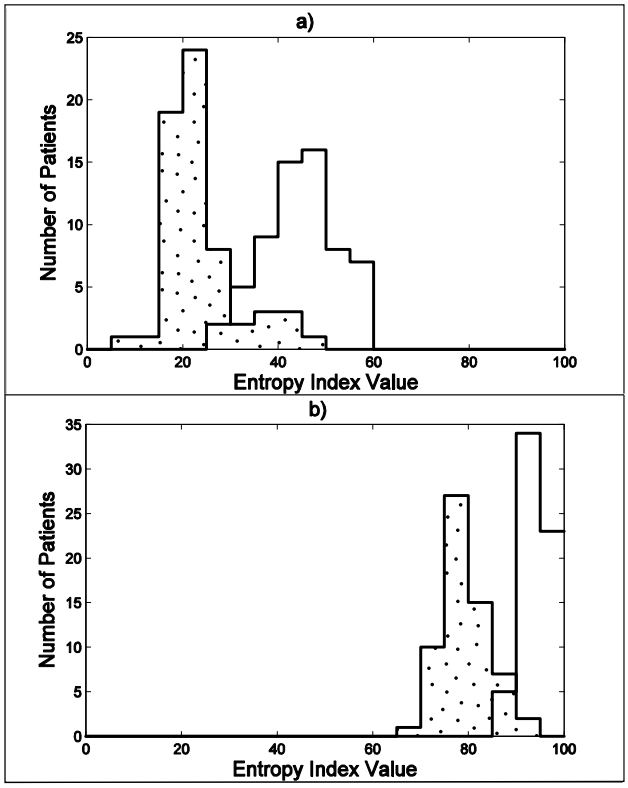


Рис. 1. Гистограмма распределения показателей энтропии для: a) ApEn(2)/ApEn(0), b) RE для СЭ, АРСС.

Литература

[1] *Зенков Л. Р.* Клиническая электроэнцефалография (с элементами эпилептологии). — Таганрог: ТРТУ, 1996. — 358 с.

[2] *Akay M.* Nonlinear Biomedical Signal Processing // Dynamic Analysis and Modelling. New York: IEEE. — 2001. — Vol. 2. — Pp. 341.

[3] *Bein B.* Entropy // Best Practice & Research Clinical Anaesthesiology. — Vol. 20, No. 1. — 2006. — Pp. 101–109.

[4] *Немирко А. П., Манило Л. А., Калиниченко А. Н., Волкова С. С.* Энтропийные методы оценки уровня анестезии по ЭЭГ-сигналу // Информационно-управляющие системы. — 2010. — № 3. — С. 37–45.

[5] *Манило Л. А., Немирко А. П.* Аппроксимация энтропии Колмогорова при анализе хаотических процессов на конечных выборках // 14-я Всероссийская конференция «Математические методы распознавания образов ММРО-14», г. Суздаль, 21–26 сентября 2009 г. — М. : МАКС пресс, 2009. — С. 405–407.

[6] *Jantti V., Alahuhta S.* Spectral entropy — what has it to do with anaesthesia, and the EEG? // British Journal of Anaesthesia. — 2004. — Vol. 93. — Pp. 150–151.

[7] *Viertio-Oja H., Maja V., Sarkela M., et al.* Description of the Entropy algorithm as applied in the Datex-Ohmeda S/5 Entropy Module // Acta Anaesthesiologica Scandinavica. — Vol. 48. — 2004. — P. 154–161.

Метод анализа фазовой синхронизации многоканальных электроэнцефалограмм*

Обухов Ю. В., Морозов А. А., Королёв М. С., Полупанов А. Ф.
{obukhov,morozov,sashap}@cplire.ru, korolevclub@mail.ru
Москва, Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН

Предложен метод анализа динамики фазовой синхронизации сигналов отведений электроэнцефалограмм (ЭЭГ) при когнитивных исследованиях. Метод основан на вычислении мгновенных фаз в точках хребтов вейвлет-спектрограмм ЭЭГ-сигналов и применении непараметрических тестов для поиска временных интервалов фазовой синхронизации. Метод используется для анализа ЭЭГ при когнитивных исследованиях.

A method of analysis of multichannel EEG phase synchrony*

Obukhov Yu. V., Morozov A. A., Korolev M. S., Polupanov A. F.
Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics of RAS, Moscow, Russia

A method of analysis of dynamics of phase synchronization of Electroencephalogram (EEG) signals in different EEG channels in cognitive researches is demonstrated. The method is based on numerical calculations of instantaneous phases in the points of ridges of wavelet spectrograms of EEG signals and application of non-parametric statistical tests for detection of temporal intervals of phase synchronization. The developed method is used for analysis of EEG signals in cognitive research.

Фазовая синхронизация сигналов ЭЭГ от различных участков мозга является важнейшей характеристикой взаимодействия участков мозга при изучении когнитивных процессов [1–5]. Исследование фазовой синхронизации состоит из двух этапов:

1) вычисление фазы сигналов в различных каналах;
2) статистическая оценка разности фаз в зависимости от времени (стандартное отклонение, энтропия Шеннона и др.).

Для оценки мгновенной фазы используют либо комплексное вейвлет-преобразование, либо преобразование Гильберта. При использовании вейвлет-преобразования оценка фазы осуществляется в довольно широкой полосе частот. Эксперименты с суррогатными сигналами показали, что различие между оценками разности фаз, вычисленными по комплексным вейвлет-преобразованиям в достаточно широкой полосе частот (до 100% от анализируемой частоты) и с помощью преобразования Гильберта, незначительны [6].

Оценка фазы ЭЭГ-сигнала в узкой полосе частот (относительно некоторой постоянной частоты) приводит к ошибкам. В то же время известно, что точки хребта вейвлет-преобразования обладают свойством стационарности фазы для гладких по времени и частоте хребтов [7, 8].

В настоящей работе описан метод оценки фазовой синхронизации ЭЭГ, основанный на:

1) вычислении мгновенной фазы ЭЭГ-сигнала в точках вейвлет-хребта и
2) применении непараметрических тестов — теста знаков или теста Вилкоксона.

Приведены примеры оценки межканальной фазовой синхронизации ЭЭГ-сигналов, измеренных в процессе выполнения когнитивных вербально-логических и пространственных тестов при использовании вейвлет-хребтов и преобразования Гильберта.

Для поиска хребтов спектрограмм используется несколько методов. Наиболее простой метод заключается в выделении локальных по времени и глобальных по частоте максимумов спектральной мощности. Отметим, что в некоторых случаях представленный метод неустойчив. При появлении на спектрограмме артефактов в виде небольших по сечению, но острых пиков на существенно иной частоте, алгоритм выделения хребта перескакивает на появившийся пик, и построенный хребет перестаёт быть непрерывным.

Более устойчивый алгоритм поиска хребтов в спектрограммах состоит в том, что все пики, существующие в сечении вейвлет-спектрограммы в рассматриваемый момент времени сравниваются между собой, и в качестве точки хребта выбирается тот из них, которому соответствует наибольшая энергия, т. е. имеющий наибольшую площадь сечения.

Принципиальной особенностью указанных методов является то, что они выделяют всегда лишь один, наиболее существенный хребет на спектрограмме. Вместе с тем, на практике встречаются случаи, когда на спектрограмме присутствуют несколько хребтов, существующих одновременно в разных частотных областях. Для анализа таких спектрограмм применяется более сложный метод,

Работа выполнена при поддержке РФФИ (08-01-00887а, 08-02-01312а, 09-04-12182-офи_м), а также программы Президиума РАН «Фундаментальные науки — медицине».

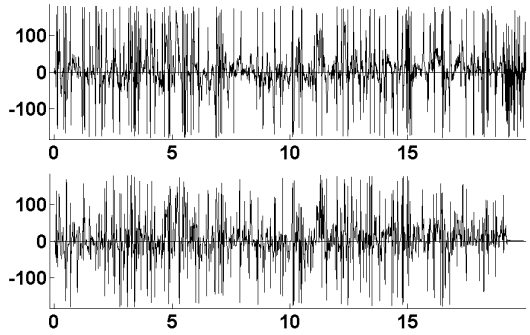


Рис. 1. Примеры зависимости разности мгновенных фаз ЭЭГ в каналах Cz и Fz от времени. Сверху — фазы по хребтам, снизу — по преобразованию Гильберта. По оси абсцисс — время в секундах, по оси ординат — разность фаз в градусах. Испытуемый решает пространственную задачу, полосовой фильтр 15–40 Гц.

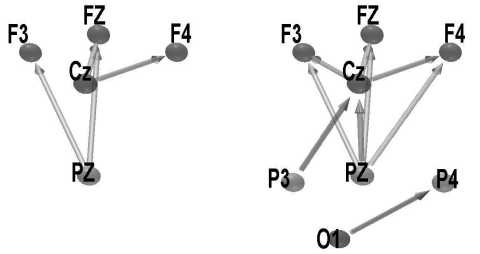


Рис. 2. Примеры межканальных связей. Слева — использованы хребты спектрограмм, справа — преобразование Гильберта. Испытуемый решает пространственную задачу, полосовой фильтр 15–40 Гц, окно 7 сек, положение окна 12,5–19,5 сек. Стрелки направлены в сторону систематического отставания фазы. Представлены стрелки с $p \leqslant 0.0003$ без учёта поправки Бонферрони.

идея которого состоит в том, что на спектрограмме адаптивно выявляются области частот, в которых ожидается обнаружение непрерывных хребтов. После этого эти области выделяются с помощью полосовой фильтрации сигнала, и в каждой из них осуществляется выделение хребта по одному из описанных выше алгоритмов.

Получив значения мгновенной фазы в точках хребта, мы исследуем законы распределения разности мгновенных фаз в различных парах каналов ЭЭГ. Например, если $\varphi_i(t)$ и $\varphi_j(t)$ — значения мгновенной фазы в каналах i и j в различные моменты времени t, исследуется закон распределения случайной величины $\Delta\varphi_{ij}(t) = \varphi_i(t) - \varphi_j(t)$.

В связи с тем, что мгновенные частоты хребтов в различных каналах могут отличаться друг от друга, функция $\Delta\varphi_{ij}(t)$ может иметь произвольные значения. Поэтому её необходимо отобразить в функцию с областью значений $[-\pi, \pi]$. Это осуществляется следующим преобразованием:

$$\Psi_{ij}(t) = \big((\Delta\varphi_{ij}(t) - \Delta\varphi_{\min} + \pi) \bmod (2\pi)\big) - \pi;$$
$$\Delta\varphi_{\min} = 2\pi \Big\lfloor \min_t\big(\Delta\varphi_{ij}(t)\big)/(2\pi) \Big\rfloor,$$

где mod— деление по модулю, $\lfloor\cdot\rfloor$ — округление в сторону минус бесконечности, min — минимум функции в рассматриваемом диапазоне времени.

На рис. 1 приведены примеры зависимости $\Psi_{ij}(t)$ в каналах Cz и Fz от времени. Сверху — мгновенные фазы вычислены с помощью хребтов вейвлет-спектрограмм, снизу — с помощью преобразования Гильберта.

Целью следующего этапа анализа является поиск интервалов времени, в которых существует фазовая синхронизация. Для этого задаётся некоторое временное окно, которое сдвигается с заданным шагом. При каждом положении окна проверяется статистическая гипотеза о равенстве нулю медианы распределения $\Psi_{ij}(t)$. Для проверки гипотезы используется непараметрический тест знаков, результатом которого является оценка ошибки первого рода при отвержении рассматриваемой гипотезы. Полученную оценку ошибки мы увеличиваем в соответствии с поправкой Бонферрони на количество сравниваемых пар каналов ЭЭГ.

Достоинством рассмотренного подхода является его устойчивость к артефактам записи ЭЭГ, связанным с просачиванием сигналов между электродами (например, вследствие физической протечки электропроводящей пасты). В таких случаях медиана разности мгновенных фаз сигналов на электродах равна нулю, и, очевидно, статистический тест не выявляет сдвига разности фаз.

Заметим, что в качестве статистического теста можно использовать и другие непараметрические тесты. В частности, тест Вилкоксона во многих случаях оказывается более чувствительным, чем тест знаков, однако при интерпретации полученных с его помощью результатов следует соблюдать осторожность. Дело в том, что закон распределения разности мгновенных фаз, как правило, не является симметричным, и, следовательно, тест Вилкоксона будет сигнализировать не об отклонении от нуля медианы распределения, а лишь о том, что оно стохастически больше или меньше нуля.

Для визуализации результатов анализа применяются трёхмерные диаграммы, на которых изображены электроды и стрелки, соединяющие пары электродов, между которыми выявлено наличие фазовой синхронизации (см. рис. 2). Направление стрелки показывает направление сдвига фазы (стрелка выходит из области, в которой наблюдается статистически значимое опережение фазы).

Предложенный метод использован для анализа данных, полученных в когнитивных экспериментах, где испытуемые решали задачи пространственного и вербально-логического типа. Предварительные результаты показали, что метод является эф-

фективным с вычислительной точки зрения и позволяет выявлять эпизоды сложного межканального взаимодействия.

Авторы выражают благодарность Г. А. Иваницкому, Р. А. Наумову и А. М. Иваницкому, которые предоставили экспериментальные данные для анализа, а также Т. А. Строгановой за конструктивную критику и участие в обсуждении работы.

Литература

[1] *Tass P., Rosenblum M. G., Weule J., Kurths J., Pikovsky A., Volkmann J., Schnitzler A., Freund H.-J.* Detection of n:m Phase Locking from Noisy Data: Application to Magnetoencephalography // Physical Review Letters. — 1998. — V. 81, N. 15. — Pp. 3291–3294.

[2] *Rosenblum M., Pikovsky A., Kurths J., Schäfer C., Tass P. A.* Phase synchronization: from theory to data analysis / In Moss F. & Gielen S. (Ed.), Handbook of Biological Physics. — Elsevier Science, 2001. — V. 4, Ch. 9. — Pp. 279–231.

[3] *Tallon-Baudry C.* Oscillatory synchrony and human visual cognition // Journal of Physiology. — Paris. — 2003. — V. 97. — Pp. 355–363.

[4] *Ливанов М. Н.* Пространственная организация процессов головного мозга. — М.: Наука, 1972.

[5] *Иваницкий А. М.* Фокусы взаимодействия, синтез информации и психическая деятельность // Журн. высш. нервн. деят. — 1993. — Т. 43. — С. 19–227.

[6] *Le Van Quyen M., Foucher J., Lachaux J.-P., Rodriguez E., Lutz A., Martinerie J., Varela F. J.* Comparison of Hilbert transform and wavelet methods for the analysis of neuronal synchrony // Journal of Neuroscience Methods. — 2001. — V. 111. — Pp. 83–98.

[7] *Guillemain P., Kronland-Martinet R.* Characterization of Acoustic Signals Through Continuous Linear Time-Frequency Representations // Proc. of the IEEE. — 1996. — V. 84, N. 4 (April). — Pp. 561–585.

[8] *Малла С.* Вэйвлеты в обработке сигналов. — М.: Мир, 2005.

Обнаружение полезного сигнала на фоне шумов большой амплитуды в задачах анализа данных магнитной энцефалографии*

Устинин М. Н., Панкратова Н. М., Панкратов А. Н.
ustinin@impb.psn.ru
Россия, Пущино, Институт математических проблем биологии РАН

Предложена информационная технология интеллектуального анализа данных для обнаружения полезного сигнала на фоне шумов большой амплитуды без использования внешней информации о моментах его возникновения. Для характеристики пространственных паттернов магнитного поля используется проецирование на базисные функции Карунена-Лоэва, а для анализа временных рядов — методы полосовой фильтрации и корреляционные методы. Технология отлажена на данных, полученных в контрольном эксперименте, и позволяет выделять патологическую активность на фоне спонтанной активности головного мозга человека.

Detection of useful signal against the background noise of high amplitude in the magnetic encephalography data analysis*

Ustinin M. N., Pankratova N. M., Pankratov A. N.
Institute of Mathematical Problems of Biology, Pushchino, Russia

The information technology of the intellectual data analysis is proposed to detect a useful signal against the background noise of high amplitude without the external information about the signal latencies. To describe the spatial behavior of magnetic field we use the Karhunen-Loeve expansion, and time series are analyzed with bandpass filtering and correlation methods. The technology is tried out in the control experiment data and makes it possible to extract the pathologic activity against the human brain spontaneous activity.

При изучении активности головного мозга методами магнитной энцефалографии возникает необходимость восстановить распределение в пространстве и во времени элементарных токовых диполей, порождающих магнитное поле, регистрируемое высокочувствительными датчиками на поверхности головы. Большое количество каналов (сотни) и высокая частота регистрации (сотни герц) дают возможность получать весьма подробную пространственно-временную картину поля, отражающую электрическую активность мозга с максимальной полнотой. При этом на экспериментальных данных отражается все многообразие задач, которые головной мозг решает одновременно, поэтому весьма актуально выделение различных компонент из суммарной электрической активности.

Задача исследования

Для получения новой информации о работе мозга необходимо применение эффективных методов обработки экспериментальных данных и постановка целенаправленных экспериментов. При этом предполагается, что избавление от внешних, по отношению к мозгу, магнитных полей обеспечивается двумя способами. С одной стороны, это условия регистрации МЭГ (экранирование и конфигурация датчиков), а с другой стороны, это предобработка энцефалограммы, устраняющая шумы от работы сердца, дыхания и т. п.

При анализе МЭГ производится выделение полезного сигнала на фоне общей спонтанной активности мозга, а затем решается обратная задача: по магнитному полю определяется расположение электрических источников на магниторезонансной томограмме головного мозга испытуемого и делаются научные или диагностические выводы.

Под полезным сигналом понимается пространственно-временная последовательность магнитных полей $m(t,k)$, регистрируемых в результате изучаемой активности головного мозга, например, отклика на какой-либо внешний стимул. Здесь $m(t,k)$ — магнитное поле, измеренное k-тым датчиком, $k = 1,\ldots,K$, в момент времени $t = t_1,\ldots,t_n$, K — общее число датчиков (каналов регистрации), $(t_n - t_1)$ — длительность полезного сигнала, например, интервал между моментами подачи одинаковых стимулов.

Шумом (в целях данной работы) $\chi(t,k)$ считается вся активность мозга, не связанная с изучаемой нами в данном эксперименте. Считается, что сигнал и шум аддитивны, так что МЭГ за время длительности отклика записывается как $m(t,k) + \chi(t,k)$, при этом $m(t,k)$ повторяется без изменений в ответ на каждый отклик, а величина $\chi(t,k)$ — случайна. Многократно повторяя стимул и регистрируя отклик на него, можно очистить сигнал

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 09-07-12108, № 10-07-00300, № 08-07-00353.

усреднением:

$$m(t_i,k)+\bar{\chi}(t_i,k)=\frac{1}{Q}\sum_{q=1}^{Q}m(t_{qi},k)+\frac{1}{Q}\sum_{q=1}^{Q}\chi(t_{qi},k),$$

где t_{qi} — i-я точка по времени в отклике на q-й стимул, t_{q1} — q-я опорная точка для усреднения, k — номер канала, $i=1,\ldots,n$ — номер отсчета по t в полезном сигнале. Такая процедура позволяет улучшить отношение сигнал/шум в $\sqrt{Q}$ раз, хотя и требует многократного повторения стимула ($Q\sim10^3-10^4$).

Для интегрированной обработки экспериментальных данных, выделения полезного сигнала и решения обратной задачи магнитной энцефалографии используется комплекс программ MRIAN [1]. Этот же комплекс позволяет анализировать и представлять результаты на магниторезонансной томограмме испытуемого.

Как правило, для выделения сигналов малой амплитуды используются либо внешние проявления патологической активности, например, запись миограммы (электрической активности мышц) при паркинсоническом треморе, либо запись стимула при экспериментах с вызванной активностью. По этим данным определяются опорные точки, по которым полезный сигнал выделяется усреднением. Однако, остается актуальной задача выделения полезного сигнала при отсутствии дополнительной информации. Особенно остро эта проблема возникает при обработке данных, снятых у пациентов с патологией, не имеющей внешних проявлений, которые можно было бы зарегистрировать, например, слуховые галлюцинации (патология tinnitus).

Обработка данных контрольного эксперимента

В качестве тестовой задачи использовались данные аудиторного эксперимента [1, 2]. Здоровому добровольцу подавался акустический стимул. Частота подачи стимула примерно 7,35 Гц, с частотой наполнения 1000 Гц . Продолжительность стимула была равна продолжительности паузы перед следующим стимулом. По моментам подачи стимула был выделен аудиторный отклик, а решение обратной задачи дало локализацию источников вызванной активности в слуховой зоне коры головного мозга. Таким образом, была получена подробная информация о структуре магнитного поля, возникающего в ответ на аудиторный стимул.

В качестве признака для обнаружения сигнала было выбрано пространственное распределение магнитного поля, соответствующее максимуму аудиторного отклика.

Для эффективного анализа информации о пространственном поведении магнитного поля над поверхностью головы было применено дискретное

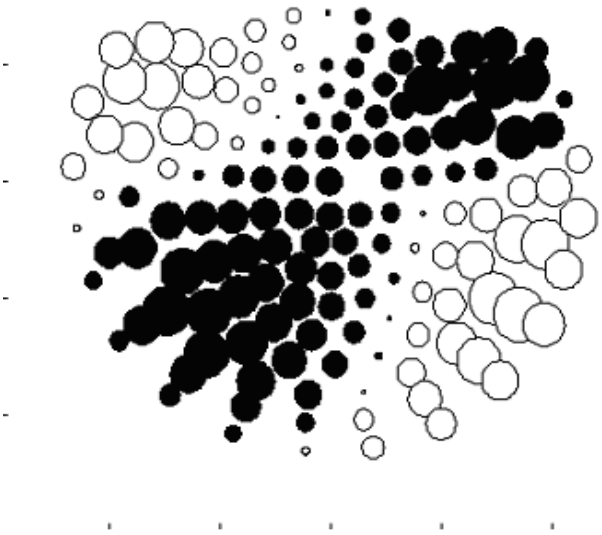


Рис. 1. Показана структура магнитного поля аудиторного отклика. Диаметры кружков соответствуют амплитуде магнитного поля в местах расположения датчиков. Черный цвет соответствует направлению поля внутрь головы, белый — наружу.

разложение Карунена-Лоэва (КЛ) [3, 4]. Эта процедура известна также как анализ главных компонент. Разложение КЛ обладает следующими оптимальными свойствами:

— минимизирует среднеквадратичную ошибку при использовании конечного числа базисных функций в разложении;

— минимизирует функцию энтропии, выраженную через дисперсии коэффициентов разложения.

При этом, в рамках данной работы, мы не пытаемся делать выводы об активности мозга в целом на основании относительных весов тех или иных собственных функций Карунена-Лоэва. Нашей целью является получение оптимального ортогонального базиса для описания пространственной компоненты магнитного поля.

Значения магнитного поля, полученные от K каналов в момент времени t_l, образуют случайный вектор $\boldsymbol{H}(t_l)$ размерности K. Рассмотрим магнитную энцефалограмму, полученную за все время эксперимента, как набор из L реализаций этого случайного вектора: $\boldsymbol{H}=\{h_k^l\}$, где $l=1,\ldots,L$ — все моменты регистрации МЭГ, а $k=1,\ldots,K$ — все каналы.

Задача о главных компонентах приводится к задаче диагонализации ковариационной матрицы C:

$$c_{ij}=\frac{1}{L-1}\sum_{l=1}^{L}(h_i^l-\bar{h}_i)(h_j^l-\bar{h}_j),\quad \bar{h}_i=\frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L}h_i^l,$$

где $i,j=1,\ldots,K$ — номера каналов. Задача на собственные значения и собственные векторы матри-

цы C записывается как

$$\sum_{j=1}^{K} c_{ij} v_j^{(k)} = \lambda_k v_i^{(k)}, \quad i,j,k = 1,\ldots,K.$$

Собственное значение λ_k определяет величину вклада пространственной моды $v^{(k)}$ в суммарный сигнал, а все K собственных векторов образуют полный ортогональный базис, оптимальный для аппроксимации $\boldsymbol{H}$.

Таким образом, вся энцефалограмма может быть тождественно представлена как разложение в ряд по ортонормированному пространственному базису с взаимно некоррелируемыми амплитудами $x_k(l)$:

$$h_i^l = \sum_{k=1}^{K} x_k(l) v_i^{(k)},$$

где $i = 1,\ldots,K$ — все каналы, $l = 1,\ldots,L$ — все моменты регистрации МЭГ.

Если расположить собственные векторы магнитоэнцефалограммы в порядке убывания собственных значений, то основная часть пространственно-временной динамики сигнала может быть представлена относительно небольшим числом базисных функций. Тогда как высшие моды, с собственными значениями малой амплитуды, несут информацию об искажении сигнала или о шуме.

Анализ собственных функций и собственных значений аудиторного эксперимента показал, что первые 10 (из 148) функций описывают уже 84% сигнала [1].

Предварительная очистка экспериментальных данных по моментам подачи стимула позволила определить распределение магнитного поля на поверхности датчиков при аудиторном отклике. При подробном рассмотрении первых базисных функций КЛ данного эксперимента оказалось, что 3-я мода разложения качественно соответствует паттерну магнитного поля аудиторного отклика.

Проводя проецирование всего экспериментального массива, т. е. K каналов за все время регистрации, на 3-ю моду разложения КЛ, получаем функцию

$$x_3(l) = \sum_{k=1}^{K} h_k^l v_k^{(3)},$$

локальный максимум которой может служить признаком возникновения аудиторного отклика.

В то же время, мода $v_k^{(3)}$ является элементом полного базиса, а значит, участвует в разложении любого пространственного паттерна МЭГ. Поэтому для выделения аудиторного сигнала необходимо провести дополнительную фильтрацию и анализ функции $x_3(l)$ во временной области.

Преобразование Фурье этой функции дает спектр частот, на котором видны выделяющиеся

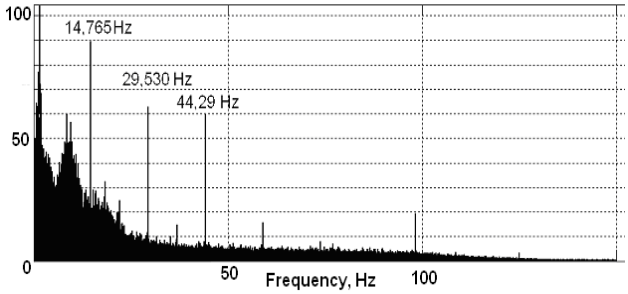


Рис. 2. Спектр Фурье функции $x_3(l)$.

пики на частотах, равных 14,765 Гц, $2\times14,765$ Гц, $3\times14,765$ Гц. Из этого спектра также видно, что ожидаемый пик на 7,35 Гц отсутствует, что объясняется тем, что длительность подаваемого стимула и пауза перед следующим одинаковы, а головной мозг реагирует как на подачу стимула, так и на его прекращение.

Далее, была выполнена полосовая фильтрация функции $x_3(l)$ с помощью специально построенных линейных цифровых фильтров, подобно тому, как это сделано в работах Беликовой Т.П. (см., например, [5]). Были рассмотрены три полосы частот, включающие в себя показанные на спектре пики. На полученных после фильтрации функциях были выбраны опорные точки для усреднения экспериментального сигнала в каждой полосе частот. Опорные точки определялись, как локальные максимумы функции $x_3(l)$, превышающие заданный уровень. После усреднения сигнала было выполнено решение обратной задачи, которое показало, что источники активности (в нашем случае это отклик на стимул) во всех трех случаях лежат в слуховой зоне коры головного мозга.

Анализ экспериментальных данных, снятых у пациента с патологией tinnitus

Процедура, отработанная на контрольном эксперименте, была применена к данным МЭГ пациента со слуховыми галлюцинациями (tinnitus). Изучение этой патологии осложняется тем, что при ней отсутствуют объективные проявления, по которым был бы возможен отбор опорных точек для дальнейшего усреднения. Исследование было начато с построения для конкретного эксперимента своего базиса Карунена-Лоэва. Разложение по базису КЛ экспериментальных данных с патологией tinnitus показало, что 4-я мода имеет пространственное распределение магнитного поля, соответствующее по своей структуре аудиторному отклику, найденному в контрольном эксперименте. Далее, были применены процедуры проецирования, усреднения и фильтрации, описанные выше. Решение обратной задачи показало, что источники най-

денной таким образом активности лежат в слуховой зоне коры головного мозга.

Выводы

Для тестовой задачи были рассчитаны корреляционные функции между отфильтрованными коэффициентами разложения Карунена-Лоэва магнитной энцефалограммы и соответственными коэффициентам аудиторного отклика. Эти корреляционные функции были введены в среду обработки магнитных энцефалограмм MRIAN. По максимумам корреляционных функций были найдены опорные точки и проведено усреднение по моментам распознавания. Решение обратной задачи показало совпадение координат источника с найденными по внешнему стимулу [6].

Данный подход был успешно применен к эксперименту, в котором искомая патологическая активность головного мозга, с одной стороны, является спонтанной, а с другой стороны, не порождает внешних физиологических признаков. Таким образом, единственным способом получения опорных точек для выделения такой активности было обнаружение ее пространственно-временных паттернов на фоне общей спонтанной активности. Предлагаемая информационная технология позволила успешно решить эту задачу. Отметим, что очистка сигнала не является идеальной, и вместе с полезным сигналом были выделены шумовые компоненты, впрочем, разделенные во времени с хорошо локализуемой активностью. По результатам работы можно сделать следующие выводы:

— предложенный подход перспективен для выделения полезных сигналов с известными свойствами из общей спонтанной активности;

— метод нуждается в развитии, прежде всего, в использовании дополнительных признаков для обнаружения сигнала.

Литература

[1] *Устинин М. Н., Махортых С. А., Молчанов А. М., Ольшевец М. М., Панкратов А. Н., Панкратова Н. М., Сухарев В. И., Сычев В. В.* Задачи анализа данных магнитной энцефалографии // Компьютеры и суперкомпьютеры в биологии. Под ред. В. Д. Лахно и М. Н. Устинина. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002 — С. 327–348.

[2] *Llinas R., Ribary U., Jeanmonod D., Kronberg E., Mitra P.* Thalamocortical dysrhythmia: A neurological and neuropsychiatric syndrome characterized by magnetoencephalography // Proc. of the National Academy of Sciences of the USA. 1999; 96: 15222.

[3] *Karhunen K.* Uber lineare Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung // Ann. Acad. Sci. Fennicae. Ser. A. I. Math.-Phys., — 1947. — № 37. — Pp. 1–79.

[4] *Loeve M.* Probability theory // Vol. II, 4th ed., Graduate Texts in Mathematics, Vol. 46, Springer-Verlag, 1978.

[5] *Беликова Т. П.* Синтез линейных фильтров для выделения диагностически важных объектов в задачах медицинской интроскопии // Цифровая оптика в медицинской интроскопии. М.: Наука, 1992.

[6] *Устинин М. Н.* Спектрально-аналитические методы обработки данных вычислительного и натурного эксперимента // Дисс. д. ф.-м. н., Пущино, 2004.

Комплексирование биометрических классификаторов*

Ушмаев О. С.
oushmaev@ipiran.ru
Институт проблем информатики РАН, Москва

В докладе рассматривается проблема комплексирования биометрических классификаторов. Определена формальная постановка задачи с учетом специфики биометрических технологий. Предложен способ комплексирования биометрических классификаторов с минимальными ошибками распознавания на основе параметризации классификаторов методом моментов. Проведен ряд экспериментов.

Combination of biometric classifiers*

Ushmaev O. S.
Institute of Informatics Problems, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

The paper briefly decribes a biometric classifiers combination (fusion) technique. We give formal problem definition. Technique for biometric classifiers combination with minimal recognition error rates is proposed. Experiments that we carried out show relevance of proposed technique.

В настоящее время мультибиометрические технологии (основанные на распознавании человека одновременно по нескольким биометрических характеристикам) являются одним из наиболее перспективных направлений развития технологий биометрической идентификации личности.

В своей основе биометрические технологии являются технологиями распознавания образов. Получаемые от биометрических сканеров данные проходят стандартные этапы обработки: улучшение изображений или сигналов (в зависимости от используемой биометрической характеристики), извлечение информативных признаков (биометрический шаблон), на основе которых принимается решение при дальнейшей верификации или идентификации личности.

Здесь следует отметить, что исторически биометрические технологии является достаточно стандартизированной областью. Требования стандартов (bioAPI, ISO, ICAO и др.) значительно ограничивают проблему идентификации с научной точки зрения. Отметим основные требования. Во-первых, биометрическая технология представляет собой черный ящик с двумя функциями: создать шаблон (CreateTemplate) и сравнить два шаблона (Match). Последняя функция обычно интерпретируется как мера близости двух шаблонов. Во-вторых, критерием качества полученного мультибиометрического классификатора является кривая DET соотношения ошибок FRR и FAR. При этом практические потребности делают необходимым точную оценку DET на этапе разработки технологий и систем, т. е. до этапа эксплуатации.

В связи с такими требованиями стандартов основными способом принятия решения при идентификации является классификация на основе сравнения меры близости шаблонов с порогом. Выбором порога можно варьировать соотношением ошибок 1-го и 2-го рода (FRR и FAR), т. е. положением на кривой DET.

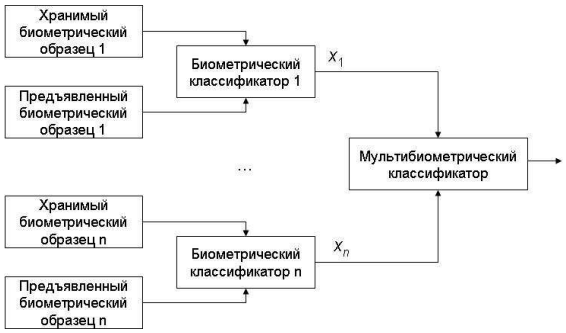


Рис. 1. Схема мультибиометрического классификатора.

При мультибиометрической идентификации, полученный в результате комплексирования мультибиометрический классификатор должен представляться таким же стандартизованным образом. Поэтому математическая постановка задачи комплексирования биометрических классификаторов (синтеза мультибиометрических классификаторов) по сравнению с общей задачей комплексирования произвольных классификаторов также ограничена требованиями стандартов и сложившейся отраслевой практикой. Основной схемой комплексирования является коллективное принятие решения на основе откликов всех или части одномодальных биометрических классификаторов (рис. 1).

Далее в докладе рассматривается метод синтеза мультибиометрических классификаторов на основе готовых одмодальных классификаторов с известными эксплуатационными характеристиками.

Постановка задачи

Введем основные определения и обозначения. На вход мультибиометрическому классификато-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-07-00433.

ру подаются два набора биометрических образцов (рис.1). Обозначим Через $x_1, \ldots, x_n$ отклики одномодальных биометрических классификаторов (меры сходства соответсвующих биометрических образцов); $f_{\text{gen}}(x_1, \ldots, x_n)$ и $f_{\text{imp}}(x_1, \ldots, x_n)$ — совместные плотности распределений $x_1, \ldots, x_n$ в «своих» и «чужих» сравнениях (когда образцы принадлежат одному человеку или разным людям соответственно); $G(x_1, \ldots, x_n)$ — комплексирующая функция, выходом которой является мера сходства мультибиометрических образцов; g_{gen} и g_{imp} — плотности результата G в «своих» и «чужих» сравнениях. На основе плотностей g_{gen} и g_{imp} вычисляется DET мультибиометрического классификатора, основанного на сравнении G с порогом.

Формально в рамках стандартов задачу можно ставить следующим образом. Пусть есть набор скалярных биометрических классификаторов, которые разделяют два класса «свои» и «чужие» (когда два сравниваемых шаблона принадлежат одному или разным людям соответственно) с известной эксплуатационной характеристикой DET. Требуется, во-первых, найти комплексирующую функцию G, DET которой удовлетворяет априорным требованиям. Во-вторых, априорно вычислить DET кривую.

Способ решения

В указанной постановке задача синтеза мультибиометрического классификатора, который основан на сравнении меры сходства с порогом, сводится к задаче разделения двух классов («свои» и «чужие» сравнения) с заданной кривой DET соотношения ошибок FRR и FAR. Теоретически минимальные ошибки FRR и FAR (и, как следствие, «оптимальную» кривую DET) достигаются путем использования в качестве комплексирующей функции G отношения максимального правдоподобия $\ln f_{\text{gen}} - \ln f_{\text{imp}}$ [1]. При известных плотностях распределений f_{gen} и f_{imp}, выходные плотности мультибиометрического классификатора могут быть численно найдены.

В этой связи предлагается следующий способ решения задачи комплексирования биометрических классификаторов:

1) оценка совместных плотностей распределений f_{gen} и f_{imp};
2) вычисление выходных плотностей g_{gen} и g_{imp} для отношения правдоподобия;
3) предсказание итоговой DET на основе g_{gen} и g_{imp}.

Основной проблемой такого подхода является оценка плотностей f_{gen} и f_{imp}. Для достоверной оценки плотностей в точках DET-кривой на уровне FAR=10^{-k} требуется база из 10^{Ck} человек, где C может варьироваться от 0,5 до 1. Обычно требования к ошибкам мультибиометрической идентификации являются очень жесткими (например, FAR<10^{-6}). Однако доступные в настоящее время базы мультибиометрических образцов содержат информации о сотнях людей. Недостаток эмпирических данных для оценки плотностей f_{gen} и f_{imp} требует разработки предположений об их структуре.

В [2] предложено решения для статистически независимых классификаторов. Совместные плотности факторизуются

$$f_{\text{gen}}(x_1, \ldots, x_n) = f^1_{\text{gen}}(x_1) \ldots f^n_{\text{gen}}(x_n),$$
$$f_{\text{imp}}(x_1, \ldots, x_n) = f^1_{\text{imp}}(x_1) \ldots f^n_{\text{imp}}(x_n).$$

В качестве оценки плотностей одномодальных классификаторов используются гистограммы распределений. В [3] для оценки плотностей предложено использовать гауссовские смеси. Оба предложенных метода не учитывают потенциальные корреляции между одномодальными классификаторами, что актуально в таких задачах, как идентификация по нескольким предъявлениям биометрической характеристики, идентификации по парным характеристикам (радужная оболочка левого и правого глаза), идентификация по зависимым модальностям (изображение лица в видимом и ИК-диапазонах). В последних работах [4] наблюдается тенденция по пренебрежению корреляциями, т. к. в некоторых задачах мультибиометрической идентификации классификация по отношению правдоподобия при оценке плотностей методами [2] (т. е. пренебрегая корреляциями) дает почти оптимальную DET. Однако не учитывается, что оптимальность получена апостериорно на эмпирических данных. Априорно такую DET предсказать без учета корреляций невозможно. В настоящей работе предлагается использовать параметризацию методом моментов, которая для одномодальных классификаторов использовалась в [5].

Параметризация плотностей

Входные плотности f_{gen} и f_{imp} оцениваются как функции следующего вида

$$f = R(x_1, \ldots, x_n) g_{\mathbf{m},\mathbf{K}}(x_1, \ldots, x_n),$$

где $\mathbf{m}$ — вектор математического ожидания f, $\mathbf{K}$ — ковариационная матрица f, $g_{\mathbf{m},\mathbf{K}}$ — базовая опорная плотность (например, многомерное нормальное распределение) с математическим ожиданием $\mathbf{m}$ и ковариационной матрицей $\mathbf{K}$ (совпадающими с соответствующими вероятнстными моментами f), и P — полином.

Коэффициенты P вычисляются таким образом, чтобы вероятностные моменты получаемой плотности совпадали с эмпирическими моментами. Вместо полиномов можно рассматривать произвольное параметризованное семейство функций. Однако полиномы имеют важное свойство. Моменты

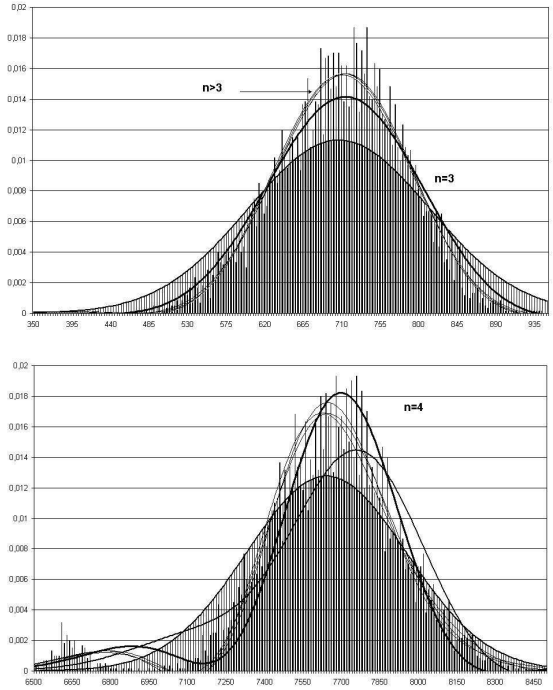


Рис. 2. Приближение плотностей методом моментов. Тесты NIST BSSR1 face-c (сверху) и face-g (снизу), «свои» сравнения.

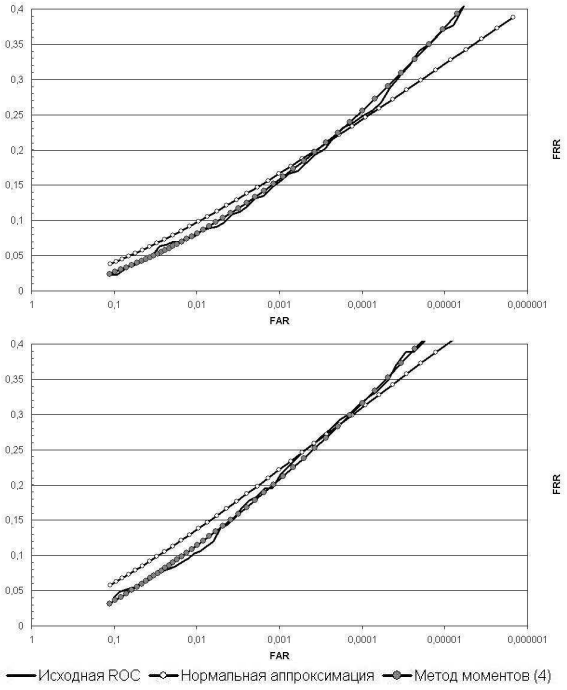


Рис. 3. Приближение DET методом моментов. Тесты NIST BSSR1 face-c (сверху) и face-g (снизу).

старших порядков и коэффициенты полинома связаны линейными соотношениями. Также метод моментов позволяет достичь сколь угодно высокой точности приближения с ростом числа используемых для оценки моментов. При этом скорость сходимости обоснована теоретически [6].

На рис. 2 и рис. 3 приведены примеры аппроксимации эмпирических плотностей и выходной DET-кривой методом моментов для тестов NIST BSSR1 [7] для различного количества используемых старших моментов. Данные NIST BSSR1 представляют собой выходные данные для 517 человек по мерам сходства для двух одномодальных классификаторов по 2D изображению лица и одного классификатора для двух отпечатков пальцев (большого левого и большого правого). Как видно из рисунков, уже четырех первых статистических моментов достаточно, чтобы точно моделировать характер DET-кривой.

Эксперименты

В экспериментах были рассмотрены две задачи комплексирования биометрических классификаторов: комплексирование независимых модальностей (изображения лица, отпечатка пальца, голоса и рукописного почерка) и комплексирование отпечатков различных пальцев (идентификация по дактокарте).

Входные DET одномодальных классификаторов для первого эксперимента представлены на рис. 4. Полученные DET мультибиометрических классификаторов представлены на рис. 5. Получен ожидаемый эффект увеличения точности при использовании нескольких модальностей. Слабой стороной проведенного эксперимента является невозможность верификации оцененных DET, так как объемы массивов мультибиометрических образцов недостаточны. Таким образом оценки DET носят теоретический характер. В целом результаты аналогичны результатам для независимых модальностей, полученных ранее [2, 3, 5].

Второй эксперимент заключается в комплексировании коррелированных классификаторов — результаты сравнения отпечатков различных пальцев коррелированны в силу одинаковых искажающих факторов [8]. Для экспериментов использовалась база NIST SD14 [9] (всего 1400 пар дактокарт, т. е. $1{,}4 \cdot 10^3$ «своих» сравнений для оценки f_{gen} и $1{,}96 \cdot 10^6$ «чужих» сравнений для оценки f_{imp}). В качестве технологии сравнений использовался алгоритм BioLink SDK. В этом эксперименте полученные теоретические DET допускают эмпирическую верификацию, т. к. база NIST SD14 содержит данные по всем отпечатков. Как следствие доступны эмпирические данные откликам одномодальных классификаторов.

Результаты эксперимента приведены на рис. 6. В частности, из рисунка видно хорошее соответствие теоретических и эмпирических DET мультибиометрических классификаторов. Таким образом данный эксперимент показывает, что предложенный способ оценки плотностей распределений

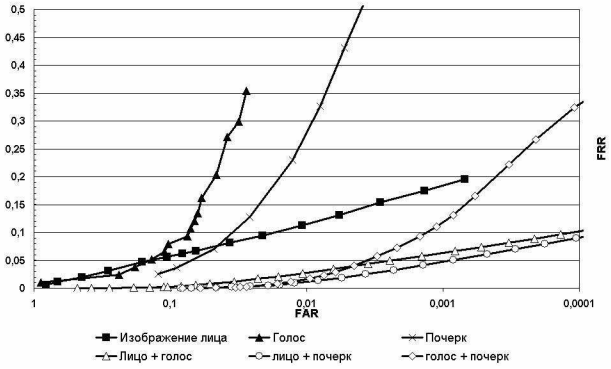


Рис. 4. DET одномодальных классификаторов.

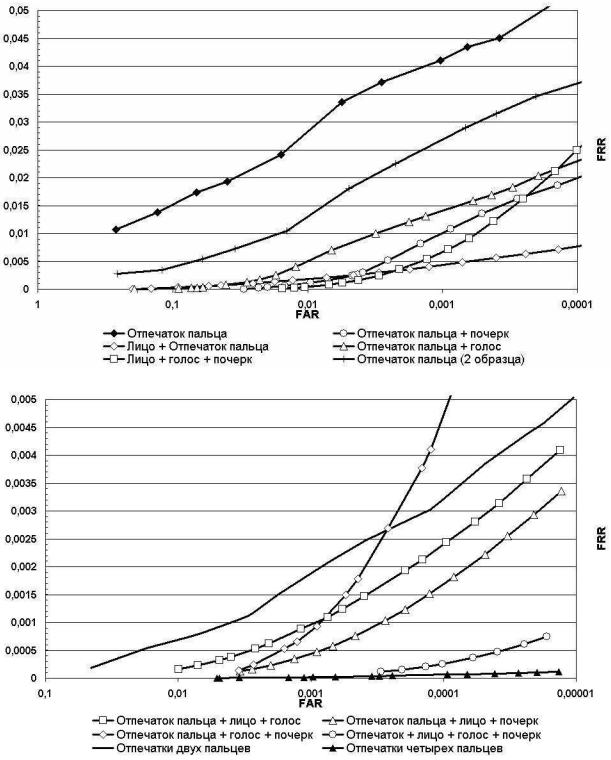


Рис. 5. DET мультибиометрических классификаторов.

выходов одномодальных классификаторов позволяет достичь соответствия априорной оценки DET. При этом теоретические DET, построенные без учета корреляций, дают значительную априорную переоценку точности идентификации.

Заключение

Предложен способ синтеза мультибиометрических классификаторов на основе комплексирования одномодальных биометрических классификаторов. Предложенный способ предполагает параметризацию набора биометрических классификаторов методом моментов. Такой способ параметризации позволяет достаточно точно приближать основную эксплуатационную характеристику биометрической идентификации: DET-кривую. Проведенные эксперименты показывают достаточную эффективность предложенного способа в задаче комплексирования коррелированных биометрических классификаторов.

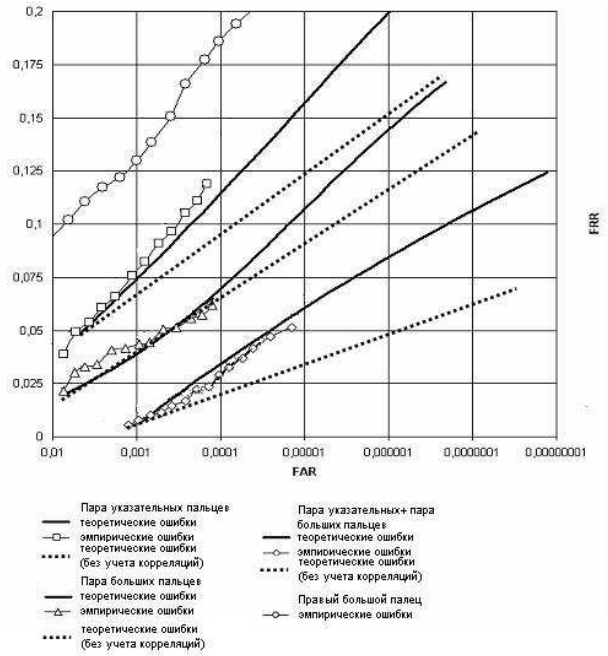


Рис. 6. DET мультибиометрического классификатора для отпечатков нескольких пальцев.

Литература

[1] *Neyman J., Pearson E. S.* On the problem of the most efficient tests of statistical hypotheses // Philos. Trans. R. Soc. Lond A. 231, 1993 — P. 289–337.

[2] *Griffin P.* Workshop on Multimodal User Authentication 2003. Panel Discussion. (`mmua.cs.ucsb.edu`).

[3] *Nandakumar K., Chen Y., Dass S., Jain A. K.* Likelihood Ratio-Based Biometric Score Fusion // Trans. PAMI, 2008 — Vol. 30, no. 2. — P. 342–347.

[4] *Nandakumar K., Ross A., Jain A. K.* Biometric fusion: does modeling correlation really matter? // Proc. IEEE BTAS2009. — P. 1–6.

[5] *Ushmaev O., Novikov S.* Biometric Fusion: Robust Approach // MMUA 06, Toulouse, France, May 11–12, 2006. Proceedings. (`mmua.cs.ucsb.edu/MMUA2006/Papers/127.pdf`).

[6] *Pugachev V.S., Sinitsin I.N.* Stochastic Systems: Theory and Applications —- World Scientific, 2001.

[7] *Ushmaev O.S., Novikov S.O.* Integral criteria for large-scale multiple fingerprint solutions // Biometric Technology for Human Identification, edited by Anil K. Jain, Nalini K. Ratha, Proceedings of SPIE Vol. 5404 (SPIE, Bellingham, WA, 2004) P. 534-543.

[8] NIST Biometric Scores Set, Release 1

[9] *Watson C.* NIST Special Database 14: Mated Fingerprint Cards Pairs 2 Version 2

Использование сложностных разложений в задачах анализа символьных последовательностей*

Гусев В. Д., Мирошниченко Л. А.
gusev@math.nsc.ru
Новосибирск, Институт математики СО РАН

Рассматриваются модификации и обобщения подхода Лемпеля и Зива к оцениванию сложности символьных последовательностей. Получаемые при этом разбиения последовательности на фрагменты, называемые нами сложностными разложениями, можно трактовать как представление последовательности в терминах повторов. Проведен анализ свойств сложностных разложений, используемых для решения задач из области «text mining» (структурный анализ и классификация текстов, выявление заимствований и др.)

Complexity decompositions in problems of symbolic sequence analysis*

Gusev V. D., Miroshnichenko L. A.
Institute of mathematics SB RAS, Novosibirsk, Russia

The modifications and generalizations of Ziv-Lempel approach to estimate the finite symbol sequence complexity are considered. The fragmentations of sequence, named as “complexity decompositions”, can be interpreted as representation of sequence in terms of repeats of a different kind. The analysis of complexity decomposition characteristics is made. These characteristics are interesting in the field of text mining (structure analysis and text classification, search for adaptations and etc.).

Символьные последовательности встречаются во многих предметных областях: в биологии (ДНК- и аминокислотные последовательности), лингвистике (тексты на естественном языке), музыкознании (нотные тексты, знаменные песнопения) и т. д. Важной характеристикой символьных последовательностей является их сложность. Общий подход к определению сложности был предложен А. Н. Колмогоровым [1]. В рамках этого подхода существуют различные приближения к оцениванию сложности последовательности конечной длины. Наибольшее распространение получила мера сложности, предложенная Лемпелем и Зивом (мера LZ [2]). Вычисление этой меры связано с разложением (факторизацией) последовательности на фрагменты, отражающие возможную схему её порождения.

Целью работы является исследование свойств сложностных разложений при различных обобщениях меры LZ. Умение «правильно трактовать» сложностные разложения облегчает решение различных задач классификации текстов, обнаружения заимствований, эволюционных перестроек и др. Для иллюстрации свойств будут использованы примеры обработки геномов вируса клещевого энцефалита (ВКЭ). При этом будем иметь в виду две содержательные задачи: поиск маркеров, разделяющих геномы ВКЭ на подтипы (дальневосточный, сибирский, и др.), а внутри подтипа — разделение геномов на высоко- и низковирулентные по степени способности микроорганизма вызывать то или иное заболевание.

Работа выполнена в рамках интеграционного проекта СО РАН №63

Мера сложности Лемпеля и Зива

Пусть Σ — конечный алфавит; $s = |\Sigma|$ — размер алфавита; S — конечная последовательность, составленная из элементов Σ (текст); $N = |S|$ — длина S; $S[i]$ — элемент S, стоящий в i-й позиции; $S[i:j]$ — фрагмент S, включающий элементы с i-го по j-й $(1 \leqslant i < j \leqslant N)$; $S = QR$ — конкатенация (сцепление) последовательностей Q и R; $S = Q^k$ — k-кратное повторение цепочки Q. Лемпель и Зив [2] предложили измерять сложность последовательности числом шагов порождающего ее процесса. Допустимыми операциями при этом являются: генерация символа (необходима, как минимум, для синтеза элементов алфавита) и копирование «готового» фрагмента из уже синтезированной части текста. Схема порождения последовательности S может быть представлена в виде конкатенации (сложностного разложения)

$$H(S) = S_1 S_2 \dots S_k \dots S_m,$$

где $S_k = S[i_{k-1}+1 : i_k]$ — фрагмент S, порождаемый на k-м шаге ($i_0 = 0$, $i_m = N$), а $m = m_H(S)$ — число шагов процесса. Из всевозможных схем порождения S выбирается минимальная по числу шагов. Сложность S по Лемпелю и Зиву $C_{\mathrm{LZ}}(S) = \min\limits_H \{m_H(S)\}$. Минимум числа шагов обеспечивается выбором для копирования на каждом шаге наиболее длинного прототипа из предыстории. По завершении $(k-1)$-го шага в качестве «предыстории» рассматривается фрагмент $S[1 : i_{k-1}]$. Обозначим через l_j $(1 \leqslant j \leqslant i_{k-1})$ длину наибольшего общего префикса каждой пары фрагментов $S[j:N]$ и $S[i_{k-1}+1:N]$. Тогда максимальное из значений l_j, достигаемое в по-

зиции $j = j(k)$, определяет длину компонента, копируемого на k-м шаге: $l_{j(k)} = i_k - i_{k-1} - 1 = \max\limits_{j \leqslant i_{k-1}} \{l_j \colon S[i_{k-1}+1 : i_{k-1}+l_j] = S[j : j+l_j-1]\}$.

Компоненты из $H(S)$ трактуются как «словарь» S. Чтобы в нем не было повторений, найденный прототип удлиняется на один элемент (генерация символа). Тогда k-й компонент разложения имеет вид:

$$S_k = \begin{cases} S[j(k) : j(k)+l_{j(k)}-1]\, S[i_k], & j(k) \neq 0, \\ S[i_{k-1}+1], & j(k) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где $j(k)$ — указатель позиции, с которой начинается копирование на k-м шаге ($j(k) = 0$, если в позиции $i_{k-1}+1$ стоит ранее не встречавшийся символ).

Пример 1. Пусть $S = abbabaabbaababba$, $\Sigma = \{a, b\}$. Схема порождения S имеет вид:

$$H(S) = a\cdot b\cdot \underline{b}a\cdot \underline{baa}\cdot \underline{bbaa}\cdot \underline{babb}\cdot \underline{a}, \quad C_{\mathrm{LZ}}(S) = 7$$
$$j(k) \ : \ 0\ 0\ 2\ \ 3\ \ \ 2\ \ \ \ 3\ \ \ \ 13$$

Компоненты разложения отделены друг от друга точками, а копируемые фрагменты подчеркнуты. Отметим следующую особенность разложения: копирование на k-м шаге начинается с позиции $j(k) \leqslant i_{k-1}$, но по мере появления новых символов $\big(S[i_{k-1}+1], S[i_{k-1}+2], \ldots\big)$ процесс может быть перенесен и на них, что формально соответствует наложению прототипа на порождаемый компонент.

Модификации меры LZ

Простейшая модификация связана с отказом от уникальности компонентов разложения, в связи с чем отпадает необходимость в добавлении к копируемому фрагменту символа $S[i_k]$ (см. (1)) на каждом шаге. Компонент разложения с длиной $l \geqslant 2$ теперь можно трактовать как повтор фрагмента, идентифицируемого указателем копирования. Представление последовательности в терминах повторов очень естественно, поскольку повтор является элементарной структурообразующей единицей любого текста. Модифицированную таким образом меру LZ будем называть мерой C_1. Для последовательности S из примера 1 получаем теперь разложение $H_1(S) = a\cdot b\cdot b\cdot ab\cdot a\cdot abba\cdot aba\cdot bba$, $C_1(S) = 8$.

Обратим внимание, что последний компонент в этом разложении (bba) допускает два варианта копирования: $j_1(8) = 2$ и $j_2(8) = 8$. В общем случае имеет место

Свойство 1 (наличие синонимичных прототипов). Для одного и того же компонента сложностного разложения может существовать несколько допустимых прототипов, отличающихся лишь значением указателя копирования.

Выбор конкретного указателя зависит от решаемой задачи. Так, при сжатии текстов лучше брать наименьший из указателей (потребуется меньше бит на его представление), тогда как при выявлении локальных структур — наибольший из них. Мы будем придерживаться последней из указанных стратегий.

В некоторых случаях многовариантность присуща и самому разложению $H_1(S)$ в том смысле, что оптимальное по Лемпелю-Зиву значение сложности может быть достигнуто и при другом разбиении на компоненты. Такую возможность поясняет

Свойство 2 (расширяемость компонентов). В разложении $H_1(S)$ компонент и его прототип нерасширяемы вправо, но могут допускать расширение влево, трактуемое как удлинение повтора. Число добавляемых слева символов при этом строго меньше длины предыдущего компонента.

Пример 2. Пусть $S = ataagcttaattaagcttc$, $\Sigma = \{a, c, g, t\}$. Схема порождения S имеет вид:

$$H_1(S) = a\cdot \underline{t\cdot a\cdot a\cdot g\cdot c\cdot t\cdot taa}\cdot \underline{ttaa\cdot gctt}\cdot c, \ C_1(S) = 11.$$

Прототипом для предпоследнего (10-го) компонента является цепочка $S[5 : 8]$. Компонент и его прототип могут быть расширены влево на 3 символа, образуя более длинный повтор (подчеркнут). Это означает, что мы имеем для S эквивалентные по числу компонентов разложения — приведённое выше и $H_1'(S) = a\cdot \underline{t\cdot a\cdot a\cdot g\cdot c\cdot t\cdot taa}\cdot t\cdot \underline{taagctt}\cdot c$, $C_1(S) = 11$. В $H_1'(S)$ 9-й компонент редуцирован, т. е. получен не по оптимальной схеме, а 10-й удлинён ($j(10) = 2$). Разложения такого типа удобны при поиске повторов с длиной выше заданного порога. Если, например, выбрать порог равный 5, то из $H_1(S)$ мы не выделим ни одного компонента (повтора), зато из $H_1'(S)$ получим повторяющуюся цепочку $taagctt$.

О наличии тандемной повторности говорит наложение прототипа на порождаемый компонент.

Свойство 3 (обнаружение тандемных повторов). Пусть текущий (k-й) порождаемый компонент начинается в позиции q_k, его длина — l_k, ближайший допустимый указатель копирования — $j(k)$. Если $j(k) + l_k \geqslant q_k$, т. е. прототип вплотную примыкает к порождаемому компоненту или накладывается на него, то имеет место тандемная повторность с длиной периода $t = q_k - j(k)$ и кратностью повторений не меньшей, чем $\lfloor l_k/t \rfloor + 1$.

Пример 3. Схема порождения S имеет вид

$$H_1(S) = g\cdot t\cdot a\cdot ta\cdot c\cdot cc\cdot g\cdot gtata\cdot tatata\cdot a\cdot$$
$$\text{№} \quad 1\ 2\ 3\ \ 4\ 5\ 6\ 7\ \ \ 8\ \ \ \ 9\ \ 10$$
$$j(k) \quad 0\ 0\ 0\ \ 2\ 0\ 6\ 1\ \ \ 1\ \ \ \ 13\ \ 20$$

Компоненты ta, cc, $(ta)^3$ копируются с прототипов, примыкающих к ним или налагающихся на них. Прототипом компонента $(ta)^3$, в позиции $q_9 = 15$, является та же цепочка в позиции $j(9) = 13$. Длина периода $t = 15 - 13$, сам период — ta, кратность

не меньше, чем 4. Реально она равна 5, поскольку компонент и прототип расширяемы влево.

Заметим, что тандемные повторы встречаются практически во всех языковых системах. Функциональная нагрузка их различна: регулирование генетических процессов, дублирование важных структурных единиц (например, терминальных кодонов), усиление значения (далеко-далеко, тихо-тихо), заполнение интервалов (в музыкальных произведениях) и др. Тандемы часто используют в качестве маркеров, различающих отдельные классы последовательностей. Например, низковирулентные штаммы ВКЭ (P-322, P-212, P-270 и др.) характеризуются серией из 6 аминокислот — валинов (V^6) в 265-й позиции исходного полипротеина, тогда как высоковирулентные штаммы имеют в этой же позиции серию из 4-х валинов (V^4)[1].

В заключение данного раздела отметим еще одно свойство сложностных разложений, важное в плане возможных обобщений меры LZ.

Свойство 4. Значение сложности существенным образом зависит от типа используемой операции копирования (типа фиксируемых повторов).

В [2] рассматривались повторы, читаемые в одном направлении ($agctta\ldots agctta$). В ДНК-последовательностях функционально значимыми являются симметричные повторы ($\overleftarrow{agctta}\ldots\overrightarrow{attcga}$), а также повторы, связанные отношением комплементарности (или повторы с переименованием элементов алфавита: $a\leftrightarrow t,\ c\leftrightarrow g$). Последние делятся на прямые комплементарные ($\overrightarrow{agctta}\ldots\overrightarrow{tcgaat}$) и симметричные комплементарные ($\overrightarrow{agctta}\ldots\overleftarrow{taagct}$). Мера C_1 может работать с любой из указанных схем копирования. Так, для последовательности S из примера 1, используя симметричное копирование вместо прямого, получим разложение с меньшим значением сложности по сравнению с прямым копированием $H_{\rm sym}(S)=\overleftarrow{a\cdot b\cdot ba\cdot ba}\cdot abba\cdot\overrightarrow{ababba}$, $C_{\rm sym}(S)=6$. Расходящиеся стрелки сверху указывают на наличие достаточно длинного симметричного повтора, который, к тому же, расширяем до полного палиндрома. Для классификации текстов может быть использован вектор из нескольких мер сложности с разными операциями копирования [4].

Обобщения меры LZ

Возможности обобщения меры LZ связаны с расширением спектра операций копирования (учёт разнотипных повторов), использованием копирования с ошибками (учет вариативности), заданием весов для разных операций и т. д. В рамках первой возможности нами реализована ДНК-ориентированная мера сложности C_2 с указанным выше набором из четырёх операций [3]. Отличие от меры C_1 заключается в том, что на каждом шаге максимальный по длине прототип выбирается перебором не только по всем позициям из предыстории, но и по всем типам допустимых операций копирования. Наряду с позиционной привязкой прототипа ($j(k)$) указывается и тип используемой на каждом шаге операции копирования $p(k)$.

Мера C_2 обладает рядом свойств, нехарактерных для C_1. Так, новый элемент алфавита иногда может быть введен и без использования операции генерации символа — путём комплементарного копирования. Другое отличие состоит в том, что при симметричном копировании невозможно наложение прототипа на синтезируемый компонент (это означало бы, что копирование началось с еще несинтезированного элемента). Самое же важное отличие состоит в том, что расширение спектра операций копирования приводит к возникновению эффекта маскировки.

Свойство 5 (эффект маскировки). Один и тот же компонент разложения в $H_2(S)$ иногда может быть получен с помощью разных операций копирования. Так как фиксируется лишь одна из них (один тип повтора), другие структуры могут оказаться замаскированными.

Пример 4. $S=tgctggccatggccagtg$ — фрагмент генома вируса Повассан. $H_2(S)=t\cdot g\cdot c\cdot\underline{\overrightarrow{tg\cdot gc\cdot ca}}\cdot\underline{\overleftarrow{tggccag}}\cdot tg$; $C_2(S)=8$. Предпоследний компонент разложения длины 7 идентифицирует комплементарный палиндром (стрелки сверху). В то же время наличие тандемного повтора длины 6 (подчеркнут) выпадает из поля зрения. Операция «прямого копирования» на этом шаге проигрывает (даёт прототип меньшей длины). Заметим, что у представителей дальневосточного подтипа ВКЭ аналогичный фрагмент (поз. 4220–4237) выглядит следующим образом (штамм Primorie-69): $t\cdot g\cdot c\cdot t\cdot\underline{a}\cdot\underline{ac}\cdot c\underline{c}\cdot tgg\cdot ccag\cdot\underline{cg}$. Одиночными мутациями (подчеркнуты) разрушены оба типа повторов, структура исчезла, сложность возросла с 8 до 10. В этом плане анализируемый фрагмент может являться маркером геномов вируса Повассан, но не представителей дальневосточного подтипа ВКЭ, также принадлежащих семейству флавивирусов.

Фрагменты с наложением структур можно сравнить с многозначными словами в естественном языке. Применительно к биологическим текстам такого рода явление получило название суперпозиции кодов. Выявление скрытых структур (или «смыслов») требует разработки специальных алгоритмов (например, [5]).

Из определения меры C_2 следует очевидное

Свойство 6. Фрагменты с высокой концентрацией повторов разного типа имеют аномально низкую сложность.

[1] Данные носят предварительный характер ввиду ограниченности подборки геномов обоих типов.

Выявлять такие фрагменты можно путём построения сложностного профиля текста $P(S,W)$ — последовательности значений сложности в скользящем вдоль текста S окне размера W. Параметрами профиля являются среднее значение сложности в окне $\bar{C}(S,W)$, среднеквадратичное отклонение — $\sigma(S,W)$ и ряд других. Фрагменты текста со значениями сложности в окне меньшими чем $\bar{C}(S,W) - 3\sigma(S,W)$ можно рассматривать как аномальные. Они интересны в структурном отношении и позиционно связаны с регуляторными участками геномов или зонами активной блочной перестройки.

Пример 5. Аномально низкий по сложности фрагмент генома ВКЭ (Р-94), $W = 30$, поз. 1926:

$$H_2(S) = \underbrace{a\cdot c\cdot a\cdot g}_{1}\cdot\underbrace{\underbrace{acag}_{1}\cdot\underbrace{tg}_{2}}\cdot\underbrace{g\overbrace{aca\cdot tgaca}^{3}}_{2'}\cdot\underbrace{cagtg}_{2}\overbrace{g\cdot tcatg}^{3}$$

Компонент *cagtgg* идентифицирует повтор (2), расширяемый вправо (с одним искажением) путём присоединения другого повтора (2') (последний замаскирован более сильной структурой (3), образующей конструкцию палиндромно-шпилечного типа). Фрагмент носит следы блочных перестроек и ярче (с меньшим числом структурных искажений) проявлен в высоковирулентных геномах.

Добавим, что по значениям $\bar{C}(S,W)$ удобно сравнивать по сложности тексты разной длины (отпадает необходимость в нормировке), а по значению σ иногда существенно отличаются друг от друга кодирующие и некодирующие участки генома.

Мера C_2 использует 4 операции копирования, две из которых, связанные с отношением комплементарности, являются ДНК-ориентированными. В силу этого данная мера не является универсальной (в смысле применимости к другим языковым системам). Обобщением меры C_2 является мера C_3, в которой поиск максимального прототипа на каждом шаге осуществляется оптимизацией по всем позициям из предыстории и по всем допустимым $s!$ подстановкам на элементах алфавита. Проблему факториального перебора для больших размеров алфавита s удаётся обойти, если заметить, что компонент разложения X длины L и его прототип Y, совпадающие с точностью до произвольной подстановки p, имеют одинаковую структуру в том смысле, что если $X[i] = X[j]$ для любых $1 \leqslant i < j \leqslant L$, то и $Y[i] = Y[j]$ (пример: $\Sigma = \{a,b,c\}$, $X = abacca$, $Y = bcbaab$, p: $b \to a$, $a \to c$, $c \to b$). Детали алгоритма описаны в [3].

В отличие от C_2 мера C_3 применима к текстам любой языковой природы. Её криптографический потенциал заключён в способности выявлять скрытые, но заведомо неслучайные типы повторности в текстах с большим алфавитом. Но поскольку с ростом числа допустимых подстановок усиливается и эффект маскировки, целесообразно после выявления доминирующих подстановок провести разложение текста, используя только их.

Завершая раздел, отметим, что все схемы сложностных разложений могут быть обобщены на случай двух и большего числа текстов. Случай двух текстов S_1 и S_2 представляет интерес для вычисления попарных мер близости в задачах распознавания образов. Используя один из текстов, например, S_1 в качестве предыстории, можно получать разложение $H(S_2/S_1)$, т. е. представлять S_2 в виде конкатенации фрагментов из S_1 и наоборот. Чем меньше компонентов в таких разложениях, тем ближе S_1 и S_2. В частности, группы близких по длине высоко- и низковирулентных геномов ВКЭ значимо разошлись по симметризованному показателю — полусумме числа компонентов в разложениях $H(S_2/S_1)$ и $H(S_1/S_2)$. Еще одно из преимуществ таких разложений в том, что они гораздо адекватнее реагируют на всякого рода блочные перестройки в геномах (дуплакации, делеции, переносы и перестановки генов), чем традиционные процедуры сравнения путём выравнивания текстов.

Выводы

Рассмотрены возможности использования сложностных характеристик текста для решения различных задач анализа данных, представленных в символьной форме (структурный анализ, классификация и сжатие текстов, выявление заимствований, реконструкция эволюции и др.). В основу положены разработанные нами модификации и обобщения известной (по многим архиваторам) схемы оценивания сложности символьной последовательности, предложенной Лемпелем и Зивом. Сформулирован ряд свойств сложностных разложений, облегчающих их интерпретацию и поясняющих возможности практического использования аппарата. Отмечены трудности общеязыкового характера, связанные с устранением неоднозначности выделяемых структурных единиц.

Литература

[1] *Колмогоров А. Н.* Три подхода к определению понятия количества информации // Проблемы передачи информации. — 1965. — Т. 1, № 1. — С. 3–11.

[2] *Lempel A., Ziv J.* On the complexity of finite sequences // IEEE Trans. on Inf. Th. — 1976. — Vol. IT-22, No. 1. — Pp. 75–81.

[3] *Gusev V. D., Nemytikova L. A., Chuzhanova N. A.* On the complexity measures of genetic sequences // Bioinformatics. — 1999. — Vol. 15, No. 12. — Pp. 994–999.

[4] *Гусев В.Д., Немытикова Л.А.* Сложностные характеристики генетических текстов // Труды межд. конф. РОАИ-4, Ч. 1. Новосибирск, 1998. — С. 83–87.

[5] *Гусев В.Д., Мирошниченко Л.А.* Поиск комбинированных структур в ДНК-последовательностях // Докл. всеросс. конф. ММРО-13, Зеленогорск, 2007. — С. 473–476.

Спектрально-аналитический подход к задачам биоинформатики*

Дедус Ф. Ф., Тетуев Р. К.
fdedus@impb.ru
Москва, МГУ им. М.В. Ломоносова

В задачах аналитического описания данных измерений предлагается реализация метода наименьших квадратов отрезками ортогональных рядов на основе классических ортогональных полиномов непрерывного или дискретного аргументов. Этот подход упрощает реализацию МНК за счет резкого сокращения объема вычислительных операций, существенного расширения границ его применимости, а получаемые результаты делает более прозрачными.

Spectral-analytical approach to the problems in bioinformatics*

Dedus F. F., Tetuev R. K.
Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

We propose an implementation of the method of least squares based on the classical orthogonal polynomials of continuous or discrete arguments for the problems of analytical representation of the data. This approach simplifies the implementation of OLS due to a reduce of computer operations, significantly extending the boundaries of its applicability, and makes it more clear and transparent.

Введение

Метод наименьших квадратов (МНК) относится к наиболее важным методам теории ошибок, оценивающий неизвестные величины по результатам измерений, содержащих случайные ошибки. Классическая задача оценки неизвестных параметров приводит к принципу наименьших квадратов, сводящемуся к минимизации функционала

$$f(x) = \int_a^b \left(y(x) - \sum_{n=1}^{N} a_n x^n \right)^2 dx,$$

где $y(x)$ — измеряемая зависимость, $\sum_{n=1}^{N} a_n x^n$ — полиномиальное приближение, a_n — искомое значение коэффициентов. Определение неизвестных коэффициентов a_n в функционале приводит к матричным преобразованиям с промежуточными матрицами размером $n \times n$. В случае, если приближающий многочлен степени n плохо описывает измеренные значения $y(x)$, то требуется повысить его степень. При этом необходимо всю процедуру определения коэффициентов a_n повторить заново. П. Л. Чебышев в середине 19-го столетия при решении задач интерполяции предложил искать минимум следующего функционала

$$f(x) = \int_a^b \left(y(x) - \sum_{n=1}^{N} A_n \varphi^n(x) \right)^2 dx.$$

Здесь суть состоит в том, что приближающий многочлен представляет собой сумму многочленов повышающих степеней, «специальным образом организованных», и коэффициентов A_n, определяемых по методу наименьших квадратов. В дальнейшем функции $\varphi_n(x)$ он определил как взаимно ортогональные, принадлежащие ортогональному базису Чебышева.

Можно показать, что вариационная задача минимизации функционала приводит к системе уравнений, решение которой определяет значения коэффициентов A_n искомого приближающего многочлена в следующем виде:

$$y(x) = \sum_{n=0}^{N} A_n \varphi^n(x),$$

где $\varphi^n(x)$ — ортогональные многочлены; A_n — коэффициенты разложения $y(x)$ по ортогональным полиномам.

В случае необходимости повышения точности аналитического описания $y(x)$ достаточно вычисления новых коэффициентов разложения A_{n+1}, A_{n+2} и т. д. При этом ранее вычисленные коэффициенты разложения остаются неизменными. Этим предложением Чебышев фактически ввел в середине 19-го столетия в решение задач по МНК применение всех классических ортогональных полиномов, которые обладают основными свойствами [3] и обеспечивает получение несмещенных оценок.

В настоящее время все классические ортогональные полиномы и функции непрерывного и дискретного аргументов представлены в виде таблиц и подробно описаны в работах [4, 5]. Их разнообразные свойства хорошо изучены и позволяют с помощью разработанных адаптивных процедур [4] получать аналитические описания различных измеренных характеристик с квазиоптимальной точностью.

За счет разнообразных весовых функций, определенных однозначно для каждого конкретного ор-

Работа частично поддержана РФФИ, проекты №№ 10-01-00609, 08-07-00353.

тогонального базиса, можно практически всегда удовлетворять различные требования к особенностям описания поступающих сигналов. Кроме того, разработаны алгоритмы и программы сверхглубокого разложения сигналов для ряда ортогональных базисов из числа классических [7]. При этом число членов разложения в указанных случаях достигает 10000 и выше.

Важная особенность аналитической аппроксимации данных на основе классических ортогональных базисов состоит в том, что отрезки ортогональных рядов линейно независимы и вся информация об описываемых сигналах сосредоточена в коэффициентах разложения. Разработана алгебра коэффициентов разложения [8], которая позволяет реализовать полную обработку сигналов в пространстве коэффициентов разложения. В работе [8] показаны пути оценки надежности получаемых результатов в виде вычисления вероятности ошибок, превосходящих определенные пределы.

Практическая ценность МНК заключается главным образом в том, что он дает в руки исследователям аналитические зависимости, позволяющие адекватно оценивать скрытые закономерности в наблюдаемых явлениях, а также проверять надежность получаемых оценок путем вычисления вероятностных характеристик с учетом соответствующих законов распределения.

Переход к задачам биоинформатики

Применения данного подхода к задачам биоинформатики выявили перспективность методов на пути ускорения алгоритмов, к примеру, поиска тандемных повторов в ДНК последовательностях, нахождения особых паттернов в белковых последовательностях, и др. Особая привлекательность заключается в том, что использование спектрально-аналитических методов придает гладкость исследуемым функциям и устойчивость получаемым результатам.

Наряду с этим компактность спектрального представления функций благоприятно сказывается на объеме всех расчетов и общей скорости разрабатываемых алгоритмов.

В широком смысле под задачами биоинформатики понимается любая вычислительная обработка биологической информации, но часто биоинформатику понимают у́же, только как обработку нуклеотидных и аминокислотных последовательностей. Под нуклеотидными последовательностями в биоинформатике понимают текстовые строки, составленные обычно из букв четырёхбуквенного алфавита $\{A, T, G, C\}$.

Ясно, что применение подходов, основанных на МНК, подразумевает работу не с текстовой информации, а с отрезками функций. Существует ряд количественных оценок, позволяющих осуществить такой переход, т. е. преобразование текста в функцию. Среди них существуют и взаимнооднозначные преобразования, например:

$$A \leftrightarrow 0; \qquad T \leftrightarrow 1;$$
$$G \leftrightarrow 2; \qquad C \leftrightarrow 3;$$

однако авторами предпочтение было отдано следующему:

$$A, T \leftrightarrow 2;$$
$$G, C \leftrightarrow 3.$$

Сделать выбор в пользу данного преобразования авторов подталкнул тот факт, что у последнего существует явный физический смысл. Дело в том, что двойная спираль ДНК, состоящая из двух свитых нуклеотидных цепочек, на разных участках имеет разную силу связи этих цепочек между собой. По этой причине при нагреве цепочки начинают разъединяться в одних местах скорее, чем в других. Вообще это связано со многими факторами, но основной из них — количество водородных связей между цепочками ДНК, и оно тем выше, чем больше на участке G и C. Так, например, участки состоящие только из G и C в 1,5 раза крепче тех, что содержат только A и T.

Если размер рассматриваемых участков ДНК определить как постоянную величину W, то получим простую формулу подсчёта количества водородных связей F для участка ДНК $[x, x + W - 1]$:

$$F_W(x) = 2\left(\sum_{i=x}^{x+W-1} A + \sum_{i=x}^{x+W-1} T\right) + 3\left(\sum_{i=x}^{x+W-1} G + \sum_{i=x}^{x+W-1} C\right),$$

где $\sum A$, $\sum T$, $\sum G$, $\sum C$ — условное обозначение количества букв A, T, G, C на заданном интервале. Как видим, тем самым предложена функция, определяющая $L - W + 1$ значений при рассмотрении ДНК строки длины L.

При вычислениях на ЭВМ принято использовать схожую, но ещё более простую функцию, определяемую в следующем виде:

$$f_W(x) = \frac{\sum_{i=x}^{x+W-1} G + \sum_{i=x}^{x+W-1} C}{W} \times 100,$$

называемую часто функцией GC-содержания, либо GC-профилем, либо даже GC-процентом ($GC\%$).

К очевидным преимуществам рассматриваемой функции можно отнести следующее:

— устойчивость при изменениях аргумента x;
— устойчивость при изменениях параметра W;
— устойчивость при замене букв в строке ДНК;
— устойчивость при вставке букв в строку ДНК;
— устойчивость при изъятии букв из строки ДНК;
— линейную временну́ю сложность $O(N)$;
— нетребовательность к объему памяти.

Конечно же, существуют и другие способы преобразования текстовой информации в ряды значений, такие, например, как расчёт энтропии участка ДНК, оценка степени подобия с некоторыии образцом и т. д. Однако преимущества этих подходов показались авторам недостаточно убедительными на фоне очевидно большей сложности расчётов.

Сравнение ДНК строк

Многие задачи биоинформатики основаны на сравнении ДНК строк, а точнее — их фрагментов. Причём сравнение это зачастую оценивается одним значением, от величины которого зависит дальнейший ход алгоритма.

Наименьший фрагмент текстовой строки — одна буква и самые первые задачи биоинформатики именно так и решались — прямым побуквенным сравнением. Сравнения проходили крайне медленно, что привело к появлению ряда новых подходов, ускоренных за счёт стадии предварительной оценки. На этой стадии оценка подобия проводилась сразу для группы букв. При этом выполняться эта операция должна была очень быстро и в результате дать бинарный ответ (совпадает/не совпадает).

К известным работам, выполненным в области биоинформатики и ускоренным за счёт бинарного сравнения группы букв, относится создание программы Tandem Repeats Finder [9], в которой такие группы называются *кортежами* (*tuples*) и состоят из 5 букв. Ещё более известный пример — алгоритм BLAST [10], в котором поиск в ДНК последовательностях основан на сравнении групп уже из 11 букв.

При дальнейшем увеличении размера группы можно было бы ожидать ещё большего ускорения работы алгоритмов, если бы не один естественный фактор — *мутации* (искажения ДНК, передающиеся по наследству). Из-за мутаций почти бессмысленно сравнивать протяжённые группы букв по принципу совпадает/не совпадает, т. к. вероятность различия велика даже в случаях, когда мы имеем копии одного и того же генетического материала. Очевидно, что бинарную оценку точного совпадения требуется заменить на количественную оценку сходства по принципу похоже/не похоже.

Существует ряд количественных оценок сходства между двумя группами букв, основанных на вычислении редакционного расстояния. *Редакционное расстояние* равно минимальному числу исправлений первой группы, после которых она будет в точности совпадать со второй. Заметим, что операция вычисления этой величины очень трудоёмкая и длительная. Такое положение фактически возвращает нас вновь к медленным побуквенным сравнениям и сильно снижает эффективность стадии предварительных оценок. Ниже приводится собственный подход к решению этой проблемы, основанный на спектрально-аналитическом методе.

Спектрально-аналитический подход

Пусть S_1 и S_2 — две ДНК строки длины L. И пусть $f_1(x)$ и $f_2(x)$ — функции GC-содержания, построенные при некотором W, $1 < W < L$. Тогда если строка S_2 является немного искажённой копией S_1, то ввиду замечательных свойств функции GC-содержания получим, что $f_1(x) \approx f_2(x)$. Отсюда приходим к простой количественной оценке сходства строк:

$$\rho(S_1, S_2) = \sum_{x=0}^{L-W} \left(f_1(x) - f_2(x)\right)^2 .$$

Очевидно, что $0 \leqslant \rho(S_1, S_2) < +\infty$ и $\rho(S_1, S_2) = 0$ при $S_1 \equiv S_2$. Теперь представим рассматриваемые функции в спектральном виде:

$$f_1(x) = \sum_{n=0}^{L-W} A'_n \varphi^n(x), \qquad f_2(x) = \sum_{n=0}^{L-W} A''_n \varphi^n(x),$$

где $\{\varphi_n(x)\}$ — функции некоторого ортонормированного базиса. Тогда, согласно равенству Парсеваля, получим:

$$\sum_{x=0}^{L-W} \left(f_1(x) - f_2(x)\right)^2 = \sum_{n=0}^{L-W} (A'_n - A''_n)^2,$$

откуда легко приходим к равенству

$$\rho(S_1, S_2) = \sum_{n=0}^{L-W} (A'_n - A''_n)^2.$$

Случай $L - W \approx L$ типичен для этой задачи, но тогда расчёт величины $\rho(S_1, S_2)$ будет осуществляться за время $O(L)$, которое однако можно значительно сократить. Действительно, в отличие от работы с текстовой информацией или с функциями, при работе со спектром можно уверенно отбросить бóльшую часть информации и при некотором $N \ll L - W$ получить всё ещё достаточно хорошие приближения функций:

$$f_1(x) \approx \tilde{f}_1(x) = \sum_{n=0}^{N} A'_n \varphi^n(x)$$

$$f_2(x) \approx \tilde{f}_2(x) = \sum_{n=0}^{N} A''_n \varphi^n(x).$$

Тогда можно заменить точное, но медленное вычисление, предложенное выше для оценки сходства строк ДНК, на приближённую, но очень быструю оценку:

$$\rho(S_1, S_2) \approx \sum_{n=0}^{N} (A'_n - A''_n)^2.$$

Значение N зависит от специфики задачи и выбирается опытным путём. Например, в одной из

таких задач, заключающейся в построении гигантской спектральной дот-матрицы [11], для величины $L - W = 1000$ получим оптимальное $N \approx 25$. *Спектральной дот-матрицей* авторы называют результат попарного сравнения фрагментов ДНК (обычно перекрывающихся), представленный визуально в виде двухмерной матрицы.

Результаты

В работе представлен вычислительный приём, предложенный в рамках развития спектрально-аналитического подхода к задачам биоинформатики. Как видим, такой приём способен на практике сильно сэкономить объемы памяти при хранении промежуточных данных и, главное, значительно снизить временну́ю сложность разрабатываемых алгоритмов.

Такое ускорение алгоритмов стало возможным благодаря замене одной медленной, хотя и точной, оценки подобия строк ДНК на другую, очень быструю, хотя и приближённую оценку. Такая замена, в свою очередь, стала возможной благодаря следующему свойству транзитивности:

— если схожи две строки ДНК, то схожи их функции GC-содержания
— если схожи функции GC-содержания, то схожи их первые спектральные коэффициенты

Отсюда приходим к утверждению: если схожи две строки ДНК, то схожи первые спектральные коэффициенты функций GC-содержания этих строк.

Оценка, предложенная в данной работе, основана на предположении верности обратного утверждения, т. е. когда близость первых спектральных коэффициентов GC-функций фиксируется как сходство соответствующих строк ДНК.

Такое предположение, строго говоря, неверно из-за отсутствия у рассмотренной транзитивности свойства симметрии. Однако практическое применение метода показало состоятельность такой оценки, скорость выявления общих участков в строках ДНК и некоторое количество ошибок первого рода (ложного срабатывания). Эти ошибки составили незначительную долю результатов и были отброшены на этапе проверки более точными методами.

В заключение заметим, что спектральные коэффициенты GC-функций можно использовать и при поиске более сложных структур в ДНК. Для этого необходимо над рядом спектральных коэффициентов предварительно провести быстрое численное преобразование [12], соответствующее требуемому аналитическому преобразованию функции GC-содержания. Благодаря такой возможности удаётся, например, обнаруживать в геномах протяжённые искажённые копии, расположенные в них последовательно (*тандемные повторы*) [13, 14].

Литература

[1] *Марков А. А.* Исчисление вероятностей. // Л.: Госиздательство, 1924.

[2] *Колмогоров А. Н.* Теория вероятностей и математическая статистика. // М.: Наука, 2005. — С. 582.

[3] *Чебышев П. Л.* Вопросы о наименьших величинах, связанные с приближенным представлением функций. // Л: Госиздательство, 1947. — С. 580.

[4] *Дедус Ф. Ф., Куликова Л. И., Панкратов А. Н., Тетуев Р. К.* Классические ортогональные базисы в задачах аналитического описания и обработки информационных сигналов. // М: Издательский отдел ВМиК МГУ, 2004. — С. 147.

[5] *Дедус Ф. Ф., Махортых С. А., Устинин М. Н., Дедус А. Ф.* Обобщенный спектрально-аналитический метод обработки информационных массивов. Задачи анализа изображений и распознавания образов. // М: Машиностроение, 1999. — С. 357.

[6] *Худсон Д.* Статистика для физиков. // М: Мир, 1970. — С. 243.

[7] *Панкратов А. Н., Бритенков А. К.* Обобщенный спектрально-аналитический метод: проблемы описания цифровых данных семейства ортогональных полиномов. // Вестник Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского. Серия Радиофизика. Н. Новгород: Издательство ННГУ, 2004. — С. 5-14.

[8] *Тетуев Р. К., Дедус Ф. Ф.* Классические ортогональные полиномы. Применение в задачах обработки данных. // М: 11-формат, 2007. — С. 60.

[9] *Benson G.* Tandem repeats finder: a program to analyze DNA sequences // Nucleic Acids Research, 1999. — V. 27, № 2. P. 573–580.

[10] BLAST: Basic Local Alignment Search Tool — Nucleotide Blast. `http://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi`.

[11] *Pankratov A. N., Gorchakov M. A., Dedus F. F., Dolotova N. S., Filippov V. V., Kulikova L. L., Makhortykh S. A., Nazipova L. L., Novikova D. A., Olshevets M. M., Pyatkov M. I., Rudnev V. R., Tetuev R. K.* Spectral analysis for identification and visualization of repeats in genetic sequences // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — V. 19, № 4. — P. 687–692.

[12] *Тетуев Р. К.* Алгебра спектральных преобразований в задачах обработки данных. — 2007. — С. 14–18. `http://www.ccas.ru/avtorefe/012avtor.pdf`.

[13] *Тетуев Р. К., Назипова Н. Н., Панкратов А. Н., Дедус Ф. Ф.* Поиск мегасателлитных тандемных повторов в геномах эукариот по оценке осцилляций кривых GC-содержания // Математическая биология и биоинформатика. — 2010. — Т. 5, № 1. — С. 30–42. `http://www.matbio.org/downloads/Tetuev2010(5_30).pdf`.

[14] *Tetuev R. K., Nazipova N. N.* — Repbase Reports. — 2010. — V. 10, № 5. — P. 776–776 .

Спектральный метод дифференцирования функций в задаче поиска мегасателлитных тандемных повторов*

Назипова Н. Н., Тетуев Р. К.
nnn@impb.ru
Пущино, Институт математических проблем биологии РАН

Мегасателлиты — это огромные (до 200 kb) тандемно повторяющиеся сегменты ДНК, определяющие во многом ход эволюции. Продемонстрировано применение нового метода обнаружения мегасателлитных последовательностей. При тотальном полногеномном сканировании геномов лабораторной мыши и серой крысы с помощью созданного программного обеспечения обнаружен ряд специфических для этих организмов мегасателлитов, а также участки со схожими паттернами, которые находятся в участках синтении двух грызунов.

A spectral approach for finding derivatives in a problem of megasatelites detection in genomic sequences*

Nazipova N. N., Tetuev R. K.
Institute of Mathematical Problems of Biology RAS, Pushchino, Russia

Megasatellites are huge (up to 200 kb) tandemly repeated DNA segments. They are determinants of the course of evolution. In this paper we present some results obtained by use of newly developed computational method. Applying the developed software for full scan of laboratory mouse and grey rat genomes we found huge specific megasatellites and very similar ones located in the synteny regions of the species.

Введение

Повторяющиеся фрагменты самой разной природы (дупликации целых геномов, сегментные дупликации, повторы генов) в геномах различных организмов встречаются достаточно часто. Еще в 70-х годах 20-го века S. Ohno [1] предположила, что повторяемость участков геномов и их дальнейшая дивергенция является движущей силой в образовании новых генов и новых биохимических процессов. Конкретные механизмы появления повторов могут быть разными (неравный кроссинговер, скользящая гиперрепликация, обратная транскрипция, транспозиция и т. д.), но само размножение повторов представляет собой типичный автокаталитический процесс. Различают два типа повторяющейся ДНК: *разнесенные* (dispersed) и *тандемные* (tandem) повторы.

Разнесенные повторы, которые не являются копиями генов, считаются результатом действия мобильных генетических элементов (транспозонов), которые могут вырезаться из одного места генома и встраиваться в другие места генома или другой геном. Транспозоны осуществляют механизмы горизонтального и вертикального переноса генетической информации. Они занимают 46,4% генома человека, 39,5% генома мыши и 40,3% генома крысы [2, 3], достаточно хорошо охарактеризованы, механизмы их действия понятны. При анализе геномов открываются все новые виды транспозонов. Самым компетентным источником по эукариотическим повторам и транспозонам является база данных RepBase [4].

Наименее понятными являются периодические участки геномов. Молекулы ДНК постоянно испытывают на себе действие различных мутационных процессов. Одним из наименее изученных типов мутаций считается копирование фрагментов ДНК, когда один кусок последовательности (образец) дублируется несколько раз, при этом начало каждой копии образца точно пристраивается в конец предыдущей копии. Результатом такой тандемной дупликации образца является участок последовательности, который называется тандемным повтором.

Тандемный повтор характеризуется длиной (длина образца) и кратностью. Каждая копия образца (и сам образец) независимо подвергаются дальнейшему мутированию (заменам, вставкам, удалениям отдельных элементов последовательности, новым тандемным дупликациям внутренних фрагментов и др.). Через определенное время каждая копия повтора дивергирует, точный тандемный повтор становится размытым. По уровню сохранности образца различают *точные*, *несовершенные* (неточные) и *скрытые* (размытые) тандемные повторы. Неточные повторы отличаются от точных наличием замен при одинаковой длине повторяющихся паттернов. Размытые тандемные повторы — это неточные тандемные повторы, искаженные вставками и делециями символов. У размытых тандемных повторов паттерны имеют не только замены символов, но и варьирующуюся длину.

Мегасателлиты — это огромные (размером от 1 до 200 kb) тандемно повторяющиеся сегменты ге-

Работа частично поддержана грантами РФФИ, проекты №09-07-00455, 10-07-00112.

номов. Их главная функция состоит в обеспечении генетического полиморфизма, они играют фундаментальную роль в передаче генетических болезней и эволюции генома [5]. Появляются они в геномах в результате внутрихромосомальных рекомбинационных процессов. Мегасателлиты являются одним из наименее распространенных видов так называемых сегментных дупликаций (segmental duplications), наличие которых в геномах было обнаружено недавно сначала в геноме человека [6], а затем и в геномах других млекопитающих. Повторяющиеся сегменты по содержанию не отличаются от остальной части генома — они содержат внутри себя и высококопийные повторяющиеся последовательности, и гены с экзон-интронной структурой. Большинство сегментных дупликаций, известных на момент появления первой сборки генома человека, были открыты экспериментально [5].

Самыми известными и общепризнанными программными разработками для выявления тандемных повторов в ДНК являются Tandem Repeat Finder (TRF) [7] и RepeatMasker [8]. Именно они используются самой компетентной на сегодняшний день базой данных по структурным элементам геномов UCSC [9] для картирования всех видов периодичностей, исключая мегасателлиты. У каждой их этих разработок своя область применения и свои ограничения на длину паттерна. Так, TRF предназначен для нахождения периодичностей с довольно сильной степенью сохранности и средней длиной паттерна периодичности (минисателлитов и сателлитов). RepeatMasker и множество других программных разработок хорошо находят простые микросателлитные последовательности. Наиболее универсальным является спектрально-статистический подход [10, 11], который выявляет тандемные повторы с паттерном периодичности любой длины: от 3-х до нескольких тысяч нуклеотидных пар (н. п.). Этот метод разрабатывался для выявления несовершенных периодичностей, к сожалению, он не применим для поиска скрытых периодичностей.

Метод и исходные данные

До сих пор не существует специализированного метода выявления размытых мегасателлитных участков геномов. Созданы методы распознавания сегментных дупликаций (т. е. разнесенных протяженных повторов). Предполагается, что этими методами можно обнаруживать и тандемные сегментные дупликации. Один из наиболее известных методов [5] основан на нарезании генома на большие куски и последующем выравнивании каждого куска со всеми остальными. При этом отмечаются все пары участков длиной более 1 kb и имеющие хорошее (более 90% сходства) выравнивание. Ограничением такого рода методов, основанных на широкомасштабном применении алгоритма BLAST, является то, что они неплохо работают при обнаружении точных и несовершенных разнесенных повторов, но непригодны для поиска размытых мегасателлитных участков в геномах.

Нами разработан эффективный и перспективный метод [12] для решения задачи распознавания участков протяженных (длиной от 1000 п. н.) размытых тандемных сегментных дупликаций. В основу этого подхода [13] положен метод определения участков осцилляций функции GC-содержания f_W последовательности в окне W, где ширина окна W зависит от того, какой длины периодичности предполагается искать. Очевидно, что периодичности на графике функции f_W будут выглядеть как выраженные осцилляции, необходимо только определить численные характеристики таких участков.

Используется аналитическое приближение функции f_W периодической функцией [14]:

$$f_W(x) \approx a_0 + f(x),$$

где a_0 — нулевой уровень GC-колебаний в окне, а

$$f(x) = A \sin \frac{x - x_0}{\lambda} 2\pi.$$

Здесь A, λ, x_0 — соответственно амплитуда, период и фазовый сдвиг гармонического колебания функции f. Длина периода λ лежит в диапазоне $\frac{W}{4} \leqslant \lambda \leqslant \frac{W}{2}$. При больших значениях W функция f_W обладает свойством устойчивости к изменению буквенного состава участка ДНК и незначительным вариациям длины периода, что особенно характерно для размытых мегасателлитных повторов. Можно утверждать, что функция f также будет обладать этим свойством, а при достаточно высокой кратности тандемных повторов (> 4) будет приближённо равна

$$f(x) \approx f_W(x) - M(f_W),$$

где $M(f_W)$ есть среднее значение исходной функции GC-содержания на участке. Применим спектральное приближение данной функции

$$f(x) \approx \tilde{f}(x) = \sum_{n=0}^{N} C_n T_n(x),$$

где $N \ll W$ — длина спектра, C_n — спектральные коэффициенты разложения функции $f(x)$ по ортогональным полиномам Чебышева I-го рода $T_n(x)$.

Для оценки степени осцилляции функции, используется свойство гармонических функций:

$$\frac{f''(x)}{f(x)} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2},$$

Преимущества спектрального подхода состоит в возможности замены в данной формуле функции $f(x)$ её спектральным приближением $\tilde{f}(x)$,

что даёт нам значительное ускорение алгоритма. Действительно, если воспользоваться рекуррентной формулой:

$$T'_{n+1} = T'_{n-1} + 2nT_n,$$

то получим итерационную линейную процедуру, используемую для определения значений спектра первой производной $\tilde{f}'(x)$. Она построена по принципу пошагового понижения степени ряда:

$$\sum_{n=0}^{k+1} C_n T'_n(x) = 2kC_{k+1}T_k + C_{k+1}T'_{k-1} + \sum_{n=0}^{k} C_n T'_n(x),$$

где $0 \leqslant k+1 < N$ — длина дифференцируемого на данном шаге спектрального ряда [12, 18]. Применяя эту процедуру повторно. получим искомую вторую производную $\tilde{f}''(x)$.

Наличие осцилляции функции GC-содержания $f_W(x)$ фиксируется, если коэффициент корреляции между спектрами функций $\tilde{f}(x)$ и $\tilde{f}''(x)$ на данном участке превышает заданное пороговое значение.

Предметом данной работы является демонстрация применения созданного программного обеспечения к исследованию геномов лабораторной мыши (*Mus musculus*, build 37.1, reference assembly C57BL/6J) и серой крысы (*Rattus norvegicus*, BN/SsNHsdMCW strain, reference assembly RGSC_v3.4). Источником геномных данных является UCSC Genome Bioinformatics Site (University of California, Santa Cruz, Genome Browser database). В результате полногеномного сканирования были найдены многочисленные размытые мегасателлиты [12], данные о которых не найдены ни в одной из наиболее компетентных баз данных (TRDB [16], UCSC [9]). При этом были обнаружены как специфические для каждого организма мегасателлиты, так и общий для этих грызунов участок тандемного мультиплицирования.

Результаты

В геноме мыши был найден участок, который имеет общую протяженность около 150000 н. п. и длину паттерна около 2400 н. п. Отдельные повторяющиеся элементы имеют сильный разброс в длинах (от 2320 до 2450 н. п.). Этот разброс обеспечивается, главным образом, вставками микросателлитных (динуклеотидных тандемных повторов) участков переменной протяженности, которые затрудняют обнаружение какой-либо периодичности более высокого порядка другими методами. Мы обнаружили периодическую структуру более высокого порядка, которая целиком укладывается в межгенном промежутке, между генами Hrh1 (histamine receptor H1) и Atg7 (autophagy related 7 gene). Простые динуклеотидные повторы переменной длины являются ограничителями консервативных (до 98% сходства) участков. Общая схема структуры обнаруженных паттернов периодичности выглядит следующим образом:

$$(CA)_n \text{ core}_1 \ (CT)_m \text{ core}_2 \ (CT)_k \text{ core}_3,$$

где $12 \leqslant n \leqslant 40$, $30 \leqslant m \leqslant 166$, $k = 12$, а максимальные длины консервативных ядер повтора core_1, core_2 и core_3, соответственно равны 88, 663 и 1566. Паттерны периодичности описанного вида повторяются целиком с небольшими изменениями ровно 60 раз. Последовательности консервативных ядер представляют собой более протяженные простые последовательности. В них не было обнаружено следов транспозонов [15]. Этот участок был нами помещен в базу RepBase под идентификатором IMPB_01 [17].

В геноме серой крысы был обнаружен участок периодичности с длиной паттерна около 2170 н. п. и кратностью более 150. Этот участок в геноме крысы просеквенирован не полностью, он прерывается пятью довольно протяженными дырами (gaps). Строго утверждать о наличии в нем периодичности мы пока не можем, однако, все имеющиеся факты говорят в пользу нашей гипотезы. Прерванные периодичности сохраняют приличный (около 80% сходства) уровень гомологии.

Крысиный паттерн периодичности имеет около 70% сходства с частью мышиного паттерна периодичности из 6-й хромосомы, если исключить из последнего все динуклеотидные вставки и первое консервативное ядро. Кроме того, 60-кратная периодичность в геноме мыши и 150-кратная периодичность в геноме крысы, паттерны которых очень похожи, лежат в одном из районов синтении двух геномов. У обоих грызунов они лежат в межгенном промежутке между генами Hrh1 и Atg7. Можно предположить, что найденная нами периодичность является характерной для геномов грызунов частью указанного межгенного промежутка. Функция этого участка не известна. Его дальнейшее исследование и поиск подобных ему паттернов в геномах других высших организмов может привести к интересным новым результатам.

Обсуждение

Обнаруженные в геноме крысы периодичности, прерванные неопределенностями, имеют важное значение не только в плане понимания структурно-функциональной организации генома, но и практическое значение для экспериментаторов, занимающихся уточнением генома крысы. Известно, что все оставшиеся «белые пятна» в геномах обусловлены наличием периодичностей. Применяющаяся для полномасштабного секвенирования технология имеет ограничения в использовании именно на таких участках. Определенный нами паттерн периодичности может помочь биологам правильно спла-

нировать свои эксперименты и быстро ликвидировать пробелы в этом участке генома крысы.

Важность поиска и подробной аннотации тандемных повторов большой длины очевидна. Они являются важнейшими носителями генетической изменчивости. Показано, что в определенных местах геномов находится тандемные повторы с различной длиной повторяющегося фрагмента и непостоянным значением кратности. Это означает, что число повторений мотива является переменной величиной, оно не постоянно внутри популяции (полиморфизм), не передается по наследству от предка к потомку (генетическая нестабильность), не постоянно даже внутри одного организма (мозаичность). Определение числа копий тандемных повторов иногда играет критическую роль, т. к. некоторые генетические болезни связаны с избыточным количеством копий того или иного мотива.

Разработанный нами метод обнаружения тандемных сегментных дупликаций [12] позволяет эффективно находить участки скрытой периодичности различной степени сохранности. Это могут быть и неточные тандемные дупликации хромосомных участков, и сильно испорченные полинуклеотидными вставками повторяющиеся образцы. Несмотря на безусловную эффективность излагаемого подхода у него все же имеется ряд характерных ограничений. В частности, вероятность обнаружения тандемных повторов тем выше, чем больше их кратность, для эффективного распознавания желательно иметь не менее 3–4 повторений мотива. В противном случае накладываются дополнительные ограничения на количество возможных мутаций и т. п.

Важный параметр алгоритма — длина окна сканирования генома W — накладывает ограничения на длину найденных паттернов периодичности. Если длина паттерна меньше длины окна, то тандемный повтор может быть при сканировании генома пропущен. Сканирование геномов с длинами окна, равными последовательным степеням двойки, начиная с минимальной длины 256 н. п., исключает эту возможность.

Литература

[1] *Ohno S.* Evolution by Gene Duplication // Berlin: Springer-Verlag, 1970.

[2] *Mouse Genome Sequencing Consortium* Initial sequencing and comparative analysis of the mouse genome // Nature. 2002. — Vol. 420, — Pp. 520–562.

[3] *Rat Genome Sequencing Project Consortium* Genome sequence of the Brown Norway rat yields insights into mammalian evolution // Nature. 2004. — Vol. 428, — Pp. 493–521.

[4] *Jurka J., Kapitonov V. V., Pavlicek A., et al.* Repbase Update, a database of eukaryotic repetitive elements // Cytogentics and Genome Research 2005. — Vol. 110, — Pp. 462–467.

[5] *Bailey J. A., Yavor A. M., Massa H. F., et al.* Segmental Duplications: Organization and Impact within the Current Human Genome Project Assembly // Genome Research 2001. — Vol. 11, — Pp. 1005–1017.

[6] *Eichler E. E.* Masquerading repeats: Paralogous pitfalls of the Human Genome // Genome Research 1998. — Vol. 8, — Pp. 758–762.

[7] *Benson G.* Tandem repeat finder: a program to analyse DNA sequences // Nucleic Acids Research 1999. — Vol. 27, — Pp. 573–580.

[8] *Smit A. F. A., Hubley R., Green P.* RepeatMasker. `http://repeatmasker.org/`.

[9] UCSC Genome Bioinformatics Site. `http://genome.ucsc.edu/`.

[10] *Чалей М. Б., Назипова Н. Н., Кутыркин В. А.* Совместное использование различных критериев проверки однородности для выявления скрытой периодичности в биологических последовательностях // Математическая биология и биоинформатика. — 2007. — Т. 2, № 1. — С. 20–35. `www.matbio.org/downloads/Chaley2007(2_20).pdf`.

[11] *Chaley M. B., Nazipova N. N., Kutyrkin V. A.* Statistical Methods for Detecting Latent Periodicity Patterns in Biological Sequences // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 2. — Pp. 358–367.

[12] *Тетуев Р. К., Назипова Н. Н., Панкратов А. Н., Дедус Ф. Ф.* Поиск мегасателлитных тандемных повторов в геномах эукариот по оценке осцилляций кривых GC-содержания // Матем. биология и биоинформатика. — 2010. — Т. 5, № 1. — С. 30–42. `www.matbio.org/downloads/Tetuev2010(5_30).pdf`.

[13] *Pankratov A. N., Gorchakov M. A., Dedus F. F., et al.* Spectral Analysis for Identification and Visualization of Repeats in Genetic Sequences // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 4. — Pp. 687–692.

[14] *Тетуев Р. К., Дедус Ф. Ф., Ольшевец М. М., Панкратов А. Н., Пятков М. И., Назипова Н. Н.* Об оценке осцилляции GC% при поиске тандемных повторов // Докл. межд. конф. Интеллектуализация Обработки Информации ИОИ-8, Кипр, 2010. — С. 483–487 (в настоящем сборнике).

[15] *Kohany O., Gentles A. J., Hankus L., Jurka J.* Annotation, submission and screening of repetitive elements in Repbase: RepbaseSubmitter and Censor // BMC Bioinformatics. — 2006. — Vol. 7. — Pp. 474.

[16] *Gelfand Y., Rodriguez A., Benson G.* TRDB — the Tandem Repeats Database. // Nucleic Acids Research. — 2007. — Vol. 35, No. 80. `cagt.bu.edu/page/TRDB_about`.

[17] *Tetuev R. K., Nazipova N. N.* Consensus of repeated region of mouse chromosome 6 containing 60 tandem copies of a complex pattern // Repbase Reports. — 2010. — Vol. 10, No. 5. — Pp. 776–776 .

[18] *Тетуев Р. К.* Алгебра спектральных преобразований в задачах обработки данных // 2007. — С. 14–18. `www.ccas.ru/avtorefe/012avtor.pdf`.

Распознавание супервторичных структур в глобулярных белках на основе спектрально-аналитического метода*

Панкратов А. Н., Руднев В. Р., Куликова Л. И., Дедус Ф. Ф., Ефимов А. В.
pan@impb.ru
Пущино, Институт математических проблем биологии РАН, Институт белка РАН

Рассматривается задача распознавания простейших супервторичных структур белков, α-α уголков. Предложен подход к задаче анализа пространственной структуры белков на основе описания основной цепи полимера с использованием естественного уравнения кривой и классических ортогональных базисов.

Recognition of super-secondary structures in globular proteins based on spectral-analytical method*

Pankratov A. N., Rudnev V. R., Kulikova L. I., Dedus F. F., Efimov A. V.
Institute of Mathematical Problems of Biology, Institute of Protein Research RAS, Pushchino, Russian Federation

Considered is the problem of recognition of the simplest super-secondary structures of proteins. Proposed is an approach to the problem of analysis of the spatial structure of proteins based on the description of the main chain of the polymer using a natural equation of the curve and the classical orthogonal bases.

Определение пространственной структуры белка является актуальной и трудоемкой задачей. Наиболее развитым и применяемым на практике является метод определения структуры на основе данных рентгеновского рассеяния. Более поздним и реже применяемым является метод определения структуры по спектрам ядерного магнитного резонанса. Теоретическое прогнозирование структуры белка оказывается возможным в среднем на 70%. Это связано с тем, что прогнозирование вторичной структуры белка (альфа и бета структур) по первичной структуре является некорректно поставленной задачей, поскольку вторичная структура зависит от третичной структуры.

Регулярные структуры (α и β участки) являются частью хорошо организованной пространственной структуры белка, образованной так называемыми водородными связями, которые осуществляются между элементами цепи полимера в случае нативного состояния. В денатурированном (расплавленном) состоянии белок имеет другую структуру, в которой, по-видимому, все или почти все водородные связи между элементами цепи белка замещены связями с растворителем.

Значение вторичной структуры белка заключается в том, что, во-первых, возможность ее образования определяется локальными характеристиками белковой цепи и, во-вторых, она имеет относительно простую геометрическую форму. Однако, она является частью более сложной пространственной структуры, которая имеет нелокальный характер, поскольку отдаленные участки цепи полимера могут контактировать друг с другом в пространственной укладке.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №08-07-00353, 09-07-12108, 10-01-00609, 10-07-00300.

Ранее были разработаны простые правила укладки белковой цепи [1], которые привели к построению структурных деревьев, которые описывают многообразие белковых структур. Как в случае с рентгеноструктурным анализом и ЯМР, дальнейшее развитие метода связано с разработкой информационных технологий. В частности, необходимо автоматически распознавать структурные мотивы в известных структурах белков, что может способствовать построению соответствия между первичной и третичной структурой белка.

Постановка задачи

Целью данного исследования является разработка программно-алгоритмического комплекса для распознавания супервторичных структур в глобулярных белках с решенными 3-D структурами методами рентгеноструктурного анализа и ядерно-магнитного резонанса. Для достижения поставленной цели были поставлены и решены следующие задачи:

- получены характеристические профили структур белков, представленных в формате PDB;
- определены характеристические параметры поиска конкретных элементов супервторичных структур (длины α-спиралей, конформации перетяжек, торсионные углы, образуемые между α-спиралями, и иные геометрические особенности структуры белковой молекулы);
- разработан алгоритм поиска заданного паттерна супервторичной структуры в исследуемых глобулярных белках на примере α-α уголка с короткой перетяжкой.

Метод решения

Для получения уникальных белковых профилей проводилось аналитическое описание координат C_α-атомов основной цепи белковой глобулы

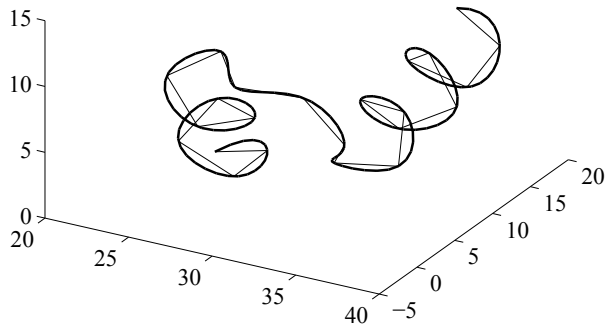


Рис. 1. Супервторичная структура α-α уголок с короткой перетяжкой.

в виде естественного уравнения кривой, полученного с использованием методов интерполяции и аппроксимации. В качестве таких методов для получения аналитического описания кривой использовались сплайны и ортогональные многочлены. Естественное уравнение пространственной кривой включает в себя параметризованное описание кривизны и кручения в зависимости от естественного параметра кривой — длины дуги. Такое описание инвариантно по отношению к выбору декартовой системы координат. Кроме того, регулярные участки — α-спирали — представляются областями постоянных значений кривизны и кручения. На рис. 1 представлена типичная структура данного класса. На рис. 2 и 3 представлены профили кривизны и кручения для этой структуры. По заданным профилям можно однозначно восстановить пространственную структуру образца с точностью до выбора системы отсчета декартовых координат.

Описание исследуемой простейшей структуры с помощью профиля кручения показывает, что в области перетяжки значение кручения отрицательное, в противоположность положительному кручению α-спиралей. Только такие структуры являются затравочными при образовании глобальной структуры белка.

Поиск образов супервторичных структур типа α-α уголков можно проводить с помощью спектрального алгоритма поиска неточных повторов в характеристических профилях [2].

Таким образом, в данной задаче методы приближенного аналитического описания применяются независимо дважды: во-первых, при построении естественного уравнения кривой, во-вторых, при сравнении профилей аналогичных участков различных белков. Заметим, что первая проблема является достаточно сложной, поскольку естественное уравнение чувствительно к третьей производной от координатных функций кривой.

Выводы

В ходе проверки алгоритмов был проведён анализ различных структур белковых молекул из базы данных UniProt PDB на предмет поиска α-α уголков. Результат свидетельствует о том, что по построенным профилям возможно распознавать структуры типа α-α уголок с короткими перетяжками. В дальнейшем планируется расширить область применения алгоритма, с возможностью распознавания широкого спектра супервторичных структур.

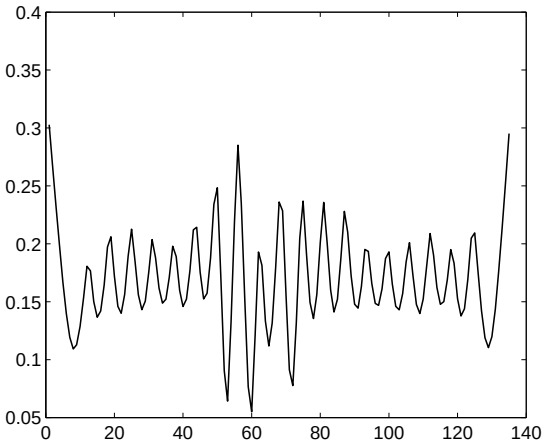


Рис. 2. Профиль кривизны структуры α-α уголок с короткой перетяжкой.

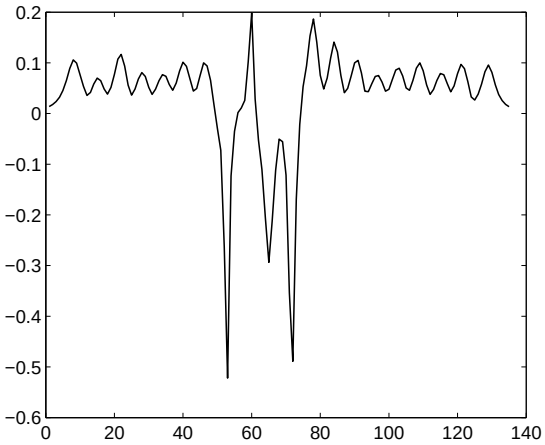


Рис. 3. Профиль кручения структуры α-α уголок с короткой перетяжкой.

Литература

[1] *Efimov A. V.* Standard Structures in Proteins // Prog. Biophys. molec. Biol. — 1993. — Vol. 60. — Pp. 201–239.

[2] *Pankratov A. N., Gorchakov M. A., Dedus F. F., Dolotova N. S., Kulikova L. I., Makhortykh S. A., Nazipova N. N., Novikova D. A., Olshevets M. M., Pyatkov M. I., Rudnev V. R., Tetuev R. K., Filippov V. V.* Spectral Analysis for Identification and Visualization of Repeats in Genetic Sequences // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 4. — Pp. 687–692.

Об оценке осцилляции GC% при поиске тандемных повторов*

Тетуев Р. К., Дедус Ф. Ф., Ольшевец М. М., Панкратов А. Н., Пятков М. И., Назипова Н. Н.
ruslan.tetuev@gmail.com
Пущино, Институт математических проблем биологии РАН

В данной работе продемонстрирована эффективность применения аналитического подхода в задаче поиска протяжённых *тандемных повторов* (ТП — схожие фрагменты цепи ДНК, расположенные в ней последовательно). Оказалось, что если ограничиться только поиском многократных ТП (> 4), то вне зависимости от размеров копий в ТП, и при низкой степени их попарного подобия ($< 80\%$), для поиска можно предложить простой алгоритм линейного времени. В результате запусков разработанных программ обнаружены уникальные протяженные ТП с периодом повтора свыше 2000 н.п., опубликованные в электронном журнале RepBase Reports.

On using GC% oscillation to find huge approximate tandem repeats*

Tetuev R. K., Dedus F. F., Olshevets M. M., Pankratov A. N., Pyatkov M. I., Nazipova N. N.
Institute of Mathematical Problems of Biology RAS, Pushchino, Russia

In this paper we want to show how easy and efficient it would be to apply an analytical approach to a problem like finding approximate *tandem repeats* (TR — consecutively repeated DNA regions having slight differences). It is proven now that when we need to find only frequentative TRs (> 4) we can easily propose an algorithm of linear time, regardless of TR's pattern size and low similarity ($< 80\%$). Running of developed program brought us a number of unique approximate TRs with period above 2000 b.p., that has been published in electronic journal RepBase Reports.

Введение

Наследственная информация передаётся в живом мире посредством молекул ДНК (дезоксирибонуклеиновых кислот), находящихся в ядре каждой клетки живого организма. При этом все эти молекулы ДНК собраны из радикалов всего четырех нуклеиновых кислот: аденина, тимина, гуанина и цитозина. Все ДНК имеют линейную структуру и могут быть однозначно записаны в виде ряда букв, например, *A-T-T-G-C-A*, где алфавит $\{A, T, G, C\}$ составлен из заглавных букв названий нуклеиновых кислот. Поэтому в литературе часто говорят о цепочках ДНК, нуклеотидных последовательностях, ДНК строках.

Следует помнить, что в действительности ДНК молекула представляет собой две цепочки одинаковой длины, идущие параллельно друг другу, звено в звено и скрученные наподобие двойной спирали. Однако вторую цепочку не указывают из-за существующего между ними строгого соответствия, известного как *принцип комплементáрности*: каждому радикалу A одной цепочки соответствует радикал T в том же месте другой цепочки, каждому $T-A$, $G-C$ и $C-G$. Например, цепь $ATTGCA$ однозначно определяет вторую, комплементарную ей цепь — $TAACGT$ (заметим, что символ дефиса, как обозначение химической связи, для краткости опускается). Основанием этому является тот факт, что двойная спираль ДНК строится и держится за счет водородных связей между парами $A \cdot T$ и $G \cdot C$. Поэтому при обозначении количества букв в ДНК употребляют термин *нуклеотúдная пара* (н. п.). Например, длина фрагмента $ATTGCA$ равна 6 н. п.

О данных биоинформатики. Определение нуклеотидной последовательности ДНК (*секвени́рование*) становится всё более быстрым и доступным, стимулируя развитие молодой ещё дисциплины — *би́оинформа́тики*. В широком смысле под задачами биоинформатики понимается любая вычислительная обработка биологической информации, но чаще под информацией понимаются только нуклеотидные и аминокислотные последовательности.

Существует ряд международных научных проектов, основной целью которых является полная *расшифровка гено́ма* определённого организма, т. е. определение его полного хромосомного набора. Сегодня особенных успехов удалось добиться в расшифровке геномов человека и мыши, длина ДНК которых достигает почти $3{\cdot}10^9$ н. п. Однако несмотря на это при обработке ДНК на ЭВМ всё ещё приходится применять пятибуквенный алфавит $\{A, T, G, C, N\}$. Дело в том, что даже геномы этих млекопитающих известны неполностью и неизвестные места цепи обозначают буквой N. Иногда это однократные вхождения N, но попадаются и весьма протяженные фрагменты, целиком заполненные буквой N и названные *N-пробелами* (*N-gaps*).

Текущие версии расшифровки геномов высших организмов, так называемые *«черновики»* (*drafts*), доступны в сети Интернет, например, по ссылке [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №06-01-08039.

О проблемах биоинформатики. Ряд задач биоинформатики тесно связан с поиском схожих фрагментов в нуклеотидных или аминокислотных последовательностях. Часто исследователь указывает в качестве образца фрагмент некоторой ДНК и требуется найти все фрагменты ДНК (другой или той же самой) достаточно похожие на этот образец. Другой типичный пример: исследователем задаётся только некоторый шаблон и требуется найти все фрагменты последовательности структурно подходящие под этот шаблон.

Как видим, данные задачи весьма схожи с теми, что возникают при работе с текстом. Стандартный поиск в текстовых редакторах даже подходит для поиска точных копий ДНК, а поиск палиндромов в ДНК строках — актуальнейшая задача. Неудивительно, что «классические» методы биоинформатики были основаны на текстовых алгоритмах. Например, алгоритм Чжу-Такаоки [2] является просто вариантом алгоритма Бойера-Мура [3], адаптированным к четырёхбуквенному алфавиту ДНК.

Современные методы биоинформатики намного сложнее классических, и всё по вине главного фактора эволюции — *мута́ций*, т.е. стойких изменений ДНК, передающихся по наследству. Природа всего живого основана на многократном переписывании, дублировании генетической информации, и ошибки здесь случаются регулярно. Причём, они бывают и очень крупные, такие, как лишняя хромосома, и совсем крохотные — *точечные мутации*.

К точечным мутациям генома обычно относят *замену*, *вставку* и *изъятие* (*mismatch*, *insertion*, *deletion*) одного нуклеотида в цепочке ДНК (или, иначе, одной буквы в ДНК строке). Такие мутации равномерно распределены по всему геному и даже в нормальных условиях окружающей среды продолжают появляться с вероятностью 10^{-9}–10^{-12} за одну клеточную генерацию, в неблагоприятных же условиях этот процесс многократно ускоряется.

Поэтому практический интерес исследователей вызывает именно поиск неточных копий. Для этого используют оценки подобия ДНК фрагментов, обычно, *редакционное расстояние* (*edit distance*), равное наименьшему числу точечных мутаций, требуемых для получения из одного фрагмента ДНК точной копии другого. Например, для фрагментов $CATGA$ и $CATTGG$ это число равно двум:

$$CATGA \xrightarrow{\text{замена}} CATGG \xrightarrow{\text{вставка}} CATTGG.$$

Также используют и *взвешенное редакционное расстояние*, когда мутации оцениваются разными баллами (штрафами). Так, если в вышеприведённом примере штраф за замену установить равным 5, а за вставку и изъятие — 10, то оптимальная редакция всё равно не изменится, а мера близости этих фрагментов уже будет равна 15.

Нетрудно оценить верхнюю границу временно́й сложности алгоритмов, сравнивающих две строки длины n в случае, когда надо определить их точное совпадение — $O(n)$. В случае же оценки редакционного расстояния методом динамического программирования получаем сложность $O(n^2)$. Даже для современных компьютеров при $n \sim 10^3$ н. п. время выполнения одной такой операции будет существенным, и тогда для генома млекопитающего длиной в несколько миллиардов нуклеотидов попарное сравнение всех его фрагментов таких размеров стало бы очень трудоёмкой задачей.

Видимо, поэтому в биоинформатике много усилий направлено на ускорение алгоритмов. Интересно, что ещё в 1966 г. был предложен подход [4], позволяющий вычислять невзвешенное редакционное расстояние за время $O(n^2/\log n)$, и хорошо известный на Западе как метод «четырёх русских» [5]. И хотя в 1995 г. предложен алгоритм решения этой задачи в общей постановке за линейное время [6], работы в этом направлении продолжаются, но сегодня они всё более привязаны к специфике решаемых задач, выбору параметров и накладываемым ограничениям.

Поиск тандемных повторов в ДНК

Тандемный повтор (ТП) — это копии некоторого ДНК фрагмента, расположенные в геноме последовательно, друг за другом. Например, цепочка $TGCCACACACATT$ содержит четыре двухбуквенных (*динуклеоти́дных*) повтора CA. Такой простой повтор часто записывают в виде $TGC(CA)_4TT$. Теперь перейдём к обсуждению более сложных ТП.

Существует большое разнообразие ТП, обнаруженных в геномах различных организмов и встречаемость ТП в них очень высока. Например, геном кукурузы (*Zea mays*) вообще наполовину состоит из генетических повторов, многие из которых являются тандемными. В биологии и медицине принято различать ТП по природе своего возникновения и по типу проявления. Причём если биологам они помогают больше узнать о ходе эволюции и её механизмах, что обсуждается в замечательной статье по исследованию разнообразия видов собак [7], то медикам они интересны как причина некоторых заболеваний, как это показано в работе [8].

Математики, работающие над поиском ТП, традиционно придерживаются упрощенной классификации, в качестве главного параметра которой выступает размер повторяющейся копии (*мотива*). Этот размер часто называется *периодом*, а количество копий — *кратностью*. В рассмотренном выше примере CA является мотивом, период равен 2, а кратность — 4. Тогда все ТП условно можно разделить на *микроповторы*, *миниповторы* и *длинные повторы*, периоды которых не превышают соответственно 10, 60 и 1000 н. п. Повторы с периодом свы-

ше 1000 н. п. иногда упоминаются как *гигантские* (*huge*) или как *мегасателлиты* (*megasatellites*).

В качестве второго не менее важного параметра при классификации ТП в биоинформатике выступает сохранность копий рассматриваемых повторов. Действительно, возраст многих повторов в геномах может составлять несколько миллионов, а иногда и миллиардов лет. За это время под действием многократных мутаций все копии повторов могут претерпеть сильные искажения и уже существенно отличаться друг от друга. В этих случаях говорят о *размытых* (*approximate*) ТП, в отличии от *точных* (*exact*), которые, видимо, имеют относительно более позднее происхождение.

Общая поставка задачи: требуется найти все ТП в заданной ДНК последовательности. Иными словами, в задаче определён лишь шаблон и следует найти все участки, структурно ему соответствующие при отсутствии какой-либо дополнительной информации. Поэтому всем исследователям, работающим над решением данной задачи, пришлось явно или косвенно восполнить этот информационный пробел и ограничить себя некоторым классом ТП. Перед изложением собственного подхода стоит упомянуть ряд методов, разработанных для этой цели ранее и провести некоторый анализ.

Анализ ранних подходов. В работе [9] излагается интересный метод поиска ТП, реализованный в виде общедоступной программы. Программа достаточно быстро обнаруживает даже размытые ТП, но имеет принципиальное ограничение на величину периода, которую сам автор метода оценил в 2000 н. п., однако проведённые вычислительные эксперименты показали сильное снижение этого порога при появлении мутаций.

В геноме менингококка (*Neisseria meningitidis*) с помощью программы mreps [10] удалось обнаружить ТП пока с самым длинным периодом из всех известных — 32036 н. п. Этот повтор состоит из двух точных копий, хотя метод позволяет искать также и ТП, искажённые точечными заменами. Минус метода — он критично реагирует на появление других точечных мутаций: вставок и изъятий.

Ещё одна интересная работа [11] привела к созданию собственной базы данных по ТП. Этот метод требует времени $O(n \log n \times k \log k)$, где n — размер рассматриваемой подстроки ДНК, а k — допустимое количество точечных мутаций. При поиске размытых ТП в присутствии всех видов точечных мутаций такой метод эффективнее, чем [10]. Естественно предположитиь, что все копии из одного участка имеют одинаковую сохранность, тогда получим $k \sim n$. Также очевидно, что при поиске тандемных повторов всё с бóльшим периодом следует увеличивать размеры рассматриваемой подстроки. Но тогда фактическая сложность алгоритма станет равной $O(n^2 \log^2 n)$. Иначе получим, что повторы с бóльшим периодом должны быть всё более точными, но тогда и преимущество данного подхода перед [10] становится уже не столь убедительным.

Новый метод поиска ТП в ДНК

С самого начала авторы данной работы осознавали, что для разработки метода, лишённого вышеозначенных недостатков и ограничений, потребуется оперировать более стабильными оценками ДНК информации. Очевидно, что оценки должны быть количественными и устойчивыми ко всем видам точечных мутаций. Явный количественный признак любой ДНК строки — её длина L. Другой простой количественный признак — GC-содержание строки (обозначается как $GC\%$ или GC), равное сумме процентного содержания в ней букв G и C:

$$GC = \frac{\sum(G) + \sum(C)}{L} \times 100\%$$

GC-содержание уже давно широко используется в биологии, например, для оценки силы связи между цепочками двойной спирали ДНК. Дело в том, что водородная связь $G \cdot C$ в 1,5 раза сильнее, чем у $A \cdot T$ и фрагменты ДНК с большим содержанием G и C обычно намного крепче. После ряда вычислительных экспериментов со всевозможными оценками предпочтение было отдано именно $GC\%$.

Следующим шагом стало построение функции, описывающей изменения выбранной оценки вдоль ДНК последовательности: определим через функцию $f_W(x)$ значение GC-содержания, полученное не для всей ДНК строки, а лишь для её фрагмента длины W, начинающегося с позиции x :

$$f_W(x) = \frac{\sum_{i=x}^{x+W-1}(G) + \sum_{i=x}^{x+W-1}(C)}{W} \times 100\%,$$

где i — позиция в строке из интервала $[x, x+W-1]$. Важно заметить, что если значение W велико, то значения функции $f_W(x)$ устойчивы и к изменению состава ДНК строки, и к изменению аргумента.

Затем при работе с функцией $f_W(x)$ было сделано важное наблюдение — часто функция $f_W(x)$ имела выраженное осциллирующее поведение в тех местах, которые соответствовали ТП в ДНК последовательности. Причём если λ — период ТП, то чаще такое проявление случалось при $\frac{1}{4}\lambda < W < \frac{1}{2}\lambda$. Получается, что выбирая W, к примеру, из ряда $256, 512, 1024, \ldots$, можно добиться проявления ТП с периодами разных порядков. Но для выполнения автоматизированного поиска мест с вероятными ТП потребуется количественная оценка степени осциллирования функции $f_W(x)$ на участке и качественный критерий отбора результатов.

На самом деле, во многих областях науки и техники существуют разные методы оценки степени

осциллирования участков кривых, проанализировав которые авторы решили предложить новый, ориентированный на специфику данной задачи.

Итак, будем считать, что функция $f_W(x)$ осциллирует на некотором участке (a, b), если она на нём приближаема в виде $f_W(x) \approx a_0 + f(x)$, где

$$f(x) = A \sin \frac{x - x_0}{\lambda} 2\pi$$

при некоторых $a_0, A, x_0, \lambda \in \mathrm{Re}$. Напомним, что

$$\frac{f''(x)}{f(x)} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \mathrm{const}.$$

Теперь если предполагать, что рассматриваемый участок занимает многократный ТП, то получим, что $a_0 \approx M_{a,b}(f_W)$, где $M_{a,b}(\cdot)$ — среднее значение на участке (a, b). Тогда можно предложить простой критерий наличия осциляции (а значит и возможного ТП) на участке (a, b) как оценку степени подобия следующих функций на том же участке:

$$f''_W(x) \sim f_W(x) - M_{a,b}(f_W).$$

При этом сглаживание рассматриваемых функций и вычисление их производных выполнялось авторами с помощью спектрально-аналитических методов, подробно изложенных в работах [12, 13, 14].

Обсуждение результатов

Главное ограничение изложенного здесь подхода — необходимое условие высокой кратности тандемных повторов. В то же время большие размытые ТП — единственный класс повторов, в обнаружении которых данный подход мог бы проявить свои исключительные свойства. На стадии разработки метода часто возникали сомнения: существуют ли многократные протяжённые размытые ТП, находятся ли они в исследуемых геномах и т.п.

Однако уже первые результаты, полученные после запусков разработанной программы, превзошли ожидания авторов. В качестве примера приведём 60-тикратный ТП с периодом в 2400 н. п. [15], обнаруженный в 6-й хромосоме мыши на участке с 114320000 по 114600000 н. п. Другой пример, четырёхкратная генетическая дупликация, обнаруженная на участке 3-й хромосомы с 113050000 по 113150000 н. п., причём размеры копий немного варьируются и приблизительно равны 33000 н. п. Интересно, что они прерываются справа N-пробелом (рис. 1), оставляя открытым вопрос о действительной кратности повтора.

В ближайшем будущем планируется провести сравнительный анализ таких тандемных повторов, обнаруженных в геномах родственных видов.

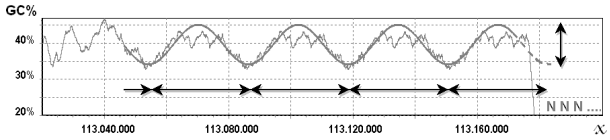


Рис. 1. Осциллирующее поведение функции $GC\%$.

Литература

[1] UCSC Genome Bioinformatics Site — Mus musculus genome, NCBI Build 37. http://genome.ucsc.edu/.

[2] *Zhu R. F., Takaoka T.* On improving the average case of the Boyer-Moore string matching algorithm // J. of Inform. Proc., 1987 — Vol. 10 (3), Pp. 173—177.

[3] *Boyer R. S., Moore J. S.* A fast string searching algorithm // Comm. ACM 20, 1977 — Pp. 762—772.

[4] *Арлазаров В. Л., Диниц Е. А., Кронрод М. А., Фараджев И. А.* Об экономном построении транзитивного замыкания ориентированного графа // Доклады АН СССР, 1966, Т. 6 — С. 487—488.

[5] *Гасфилд Д.* Строки, деревья и последовательности в алгоритмах: Информатика и вычислительная биология // БХВ-Петербург, 2003. — с. 656.

[6] *Ukkonen E.* On-line construction of suffix trees // Algorithmica, 1995. — Vol. 14, No. 3. Pp. 249–260.

[7] *Pennisi E.* GENETICS: A Ruff Theory of Evolution: Gene Stutters Drive Dog Shape // Science, 2004. — Vol. 306, No. 5705. Pp. 2172.

[8] *Tran N., Bharaj B. S., Diamandis E. P., Smith M., Li B. D. L., Yu H.* Short Tandem Repeat Polymorphism and Cancer Risk: Influence of Laboratory Analysis on Epidemiologic Findings // Cancer Epidemiology, Biomarkers & Prevention, 2004. — Vol. 13, No. 12. Pp. 2133–2140.

[9] *Benson G.* Tandem repeats finder: a program to analyze DNA sequences // Nucleic Acids Research, 1999. — Vol. 27, No. 2. Pp. 573–580.

[10] *Kolpakov R., Bana G., Kucherov G.* mreps: efficient and flexible detection of tandem repeats in DNA // Nucleic Acids Research, 2003. — Vol. 31, No. 13. Pp. 3672–3678.

[11] *Sokol D., Benson G., Tojeira J.* Tandem Repeats over the Edit Distance // Bioinformatics, 2007. — Vol. 23, Pp. 30–35.

[12] *Тетуев Р. К.* Алгебра спектральных преобразований в задачах обработки данных. — 2007. — С. 14–18. www.ccas.ru/avtorefe/012avtor.pdf.

[13] *Pankratov A.N., Gorchakov M.A., Dedus F.F., Dolotova N.S., Filippov V. V., Kulikova L.L., Makhortykh S.A., Nazipova L.L., Novikova D.A., Olshevets M.M., Pyatkov M.I., Rudnev V.R., Tetuev R.K.* Spectral analysis for identification and visualization of repeats in genetic sequences // Patt. Rec. and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 4. — Pp. 687–692.

[14] *Тетуев Р. К., Назипова Н. Н., Панкратов А. Н., Дедус Ф. Ф.* Поиск мегасателлитных тандемных повторов в геномах эукариот по оценке осцилляций кривых GC-содержания // Матем. биология и биоинформатика. — 2010. — Т. 5, № 1. — С. 30–42. www.matbio.org/downloads/Tetuev2010(5_30).pdf.

[15] *Tetuev R. K., Nazipova N. N.* — Repbase Reports. — 2010. — Vol. 10, No. 5. — Pp. 776–776 .

Анализ мотивов в задаче распознавания вторичной структуры белка на основе критерия разрешимости*

Торшин И. Ю.
tiy135@yahoo.com
Москва, Центр Систем Прогнозирования и Распознавания; Российское отделение Института микроэлементов ЮНЕСКО

В данной работе описывается развитие и применение формального описания задачи распознавания вторичной структуры белка. Вводятся ключевые термины (мотив, оценка информативности мотива, порядок на мотивах), позволяющие установить взаимосвязи между разрабатываемым формализмом и реально существующими множествами прецедентов. Приводятся результаты тестирования разрешимости задачи на малых выборках прецедентов. Показано, что анализ разрешимости задачи позволяет проводить эффективный отбор наиболее информативных мотивов. При этом, разрешимость задачи сохраняется при 3–20-кратном сокращении исследованных множеств мотивов.

Analysis of motifs in the problem of protein secondary structure recognition using the solvability criterion*

Torshin I. Y.
Center of the forecasting and pattern recognition systems; Russian branch of the Trace Elements Institute of UNESCO, Moscow, Russia

The paper presents a development and application of the formalism for the problem of proteins secondary structure recognition. We introduce the key terms (motif, informativeness of a motif, order on the motives) which allow to establish the relationship between the formalism developed and the actually available datasets of the precedents. The results of the solvability testing are presented for the sample precedent sets. It is shown that the solvability of the analysis allows very efficient selection of the most informative motifs. The problem retains solvability after the 3–20-fold reduction of the investigated sets of motives.

Распознавание вторичной структуры белка на основе его первичной структуры (аминокислотной последовательности) — одна из важнейших задач современной биологии [1–3]. Актуальность задачи обусловлена значительным объемом данных по первичной структуре белка (миллионы аминокислотных последовательностей) и в сотни раз меньшим количеством экспериментальных данных по третичной и, следовательно, вторичной структуре белка. Это позволяет рассматривать накопленный материал о третичном и вторичном уровнях структуры белка как обучающую выборку для задачи распознавания вторичной структуры белка по первичной и применять алгебраический подход к проблемам распознавания [3–7].

В рамках настоящего исследования данная задача рассматривается как перевод последовательности символов из одного алфавита в другой. Особого внимания заслуживает локальность рассматриваемой задачи. В работах [2, 3] было впервые предложено точное описание данной задачи распознавания и рассмотрены её разрешимость, регулярность и локальность. Введение ключевых понятий для анализа локальности (окрестность, маска, система масок, монотонность и тупиковость систем масок) позволило предложить метод построения безызбыточных систем масок.

Одним из основных результатов работ [2, 3] является формулировка критериев разрешимости исследуемой задачи распознавания, так как полученные критерии разрешимости позволяют проведение вычислительных экспериментов. В настоящей работе представлено дальнейшее развитие формализма и результаты этих экспериментов. Эксперименты проводились на подвыборках общедоступных экспериментальных данных по первичной, вторичной и третичной структурам белков (PDB, Protein Data Bank) [8].

Критерий разрешимости на объектах и мегасловах

В рамках разрабатываемого формализма используются два алфавита: алфавит A для описания первичной структуры белка («верхнего слова») и алфавит B для описания вторичной структуры («нижнего слова»). Пусть $A = \{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$, $n > 0$ и $B = \{b_1, b_2, \ldots, b_m\}$, $m > 0$. С точки зрения проблемной области, алфавит A однозначно определяется как $A = \{A, C, D, E, F, G, H, I, K, L, M, N, P, R, S, T, V, W, Y\}$. Алфавит B может быть определён существенно различными способами [3], для целей настоящей работы вполне приемлем трехбуквенный алфавит B, $B = \{S, H, L\}$. Слово в алфавите A будем обозначать как $\boldsymbol{V}$, в алфа-

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №09-07-12098, №09-07-00212-а, №09-07-00211-а.

вите B — как $\boldsymbol{W}$. *Критерий локальной разрешимости* с использованием отдельных масок (выражение (6″) в работе [3]) формулируется так:

$$\underset{\Pr}{\forall}(\boldsymbol{V_1},\boldsymbol{W_1}),(\boldsymbol{V_2},\boldsymbol{W_2}),\forall(i,j);$$

$$\overset{|M|}{\underset{k=1}{\forall}}\hat{m}_k\colon \big(\eta(i,\hat{m}_k,\boldsymbol{V_1})=\eta(j,\hat{m}_k,\boldsymbol{V_2})\big)\Rightarrow W_1^i=W_1^j;$$

$$\ell(M)<i\leqslant|\boldsymbol{V_1}|-r(M);$$
$$\ell(M)<j\leqslant|\boldsymbol{V_2}|-r(M);$$
$$i\neq j, \tag{1}$$

где $\Pr$ — множество прецедентов, i, j — ведущие позиции в прецедентах, $\hat{m}=\{\mu_1,\ldots,\mu_m\}$ — маска ($\mu_i\in\mathbb{Z}$, $\mu_1<\cdots<\mu_m$), $M=\{\hat{m}_1,\ldots,\hat{m}_N\}$ — множество (система) масок, $\eta(i,\hat{m},\boldsymbol{U})$ — оператор выбора подслова, а $\ell(M)$ и $r(M)$ — границы для описания краевых эффектов,

$$\ell(M)=\max\big(-\max_{k=1,\ldots,N}\mu_1^k,0\big),$$
$$r(M)=\max\big(\min_{k=1,\ldots,N}\mu_{|m_k|}^k,0\big).$$

В дальнейшем изложении подразумевается существование указанных выше ограничений по $\ell(M)$ и $r(M)$ на значения i и j.

Для более компактного представления утверждения (127) введем понятие i-го *мегаслова*, представляющего собой список из N подслов. В i-ой позиции произвольного прецедента по системе масок считывается мегаслово $(\boldsymbol{v_1},\ldots,\boldsymbol{v_N})_i$, где $\boldsymbol{v_k}=\eta(i,\hat{m}_k,\boldsymbol{V})$ и критерий разрешимости (127) формулируется следующим образом:

$$\underset{\Pr}{\forall}(\boldsymbol{V_1},\boldsymbol{W_1}),(\boldsymbol{V_2},\boldsymbol{W_2});\tag{2}$$
$$\forall(i,j)\colon(\boldsymbol{v_1^1},\ldots,\boldsymbol{v_N^1})_i=(\boldsymbol{v_1^2},\ldots,\boldsymbol{v_N^2})_j\Rightarrow W_1^i=W_2^j.$$

Утверждения (127), (2) соответствуют локальной форме задачи распознавания вторичной структуры, т. е. существованию функции $f\colon A^{|\hat{M}_\Sigma(M)|}\to B$, где $\hat{M}_\Sigma(M)$ — *объединенная маска* M, $\hat{M}_\Sigma(M)=\bigcup\limits_{k=1}^{|M|}\hat{m}_k$. *Элементарным объектом* q назовем совокупность аргумента и значения функции f, т.е. пару $\Big(\eta\big(i,\hat{M}_\Sigma(M),\boldsymbol{V}\big),W_i\Big)\in Q$, где Q — множество объектов. Очевидно, что множество объектов $Q(\Pr,M)$ однозначно получается из множества прецедентов $\Pr$ перебором всех допустимых значений ведущих позиций i по объединенной маске системы масок M. Тогда запись критерия разрешимости (2) упрощается:

$$\underset{Q}{\forall}(i,j)\colon(\boldsymbol{v_1},\ldots,\boldsymbol{v_N})_i=(\boldsymbol{v_1},\ldots,\boldsymbol{v_N})_j\Rightarrow W_i=W_j.\tag{3}$$

Применив логический оператор НЕ и обозначив мегаслова i-го и j-го объектов как $\bar{v}_i=(\boldsymbol{v_1},\ldots,\boldsymbol{v_N})_i$ и $\bar{v}_j=(\boldsymbol{v_1},\ldots,\boldsymbol{v_N})_j$, получаем обратную форму утверждения (3):

$$\forall_Q(i,j)\colon\boldsymbol{W_i}\neq\boldsymbol{W_j}\Rightarrow\bar{v}_i\neq\bar{v}_j.\tag{4}$$

Очевидно, что два мегаслова различны, если не совпадает хотя бы одно составляющее их подслово, так что

$$\underset{Q}{\forall}(i,j)\colon W_i\neq W_j\Rightarrow\overset{|M|}{\underset{k=1}{\exists}}k\colon\boldsymbol{v_k^i}\neq\boldsymbol{v_k^j}.\tag{5}$$

Для практического тестирования разрабатываемого формализма особый интерес представляет установление минимальных наборов подслов гарантирующих разрешимость. Назовем *мотивом* пару из подслова и соответствующей маски $(\hat{m}_k,\boldsymbol{v_k})$. Пусть $\mathrm{MO}(\Pr,M)$ — множество всех мотивов, наблюдающихся в словах из $\Pr$ при данной системе масок M, включая нулевой элемент. Тогда условие (3)–(5) записывается как *критерий разрешимости на некотором множестве мотивов*:

$$\underset{Q(\Pr,M)}{\forall}(i,j)\colon W_i\neq W_j\Rightarrow$$
$$\Rightarrow\overset{|\mathrm{MO}|}{\underset{k=1}{\exists}}k\colon(\mathrm{mo}_k\in\bar{v}_i)\neq(\mathrm{mo}_k\in\bar{v}_j).\tag{6}$$

Редукция множества мотивов $\mathrm{MO}(\Pr,M)$ и нахождение тупиковых $\mathrm{MO}^{\intercal}$ является частным случаем применения классификации значений признаков в рамках теории универсальных и локальных ограничений [6, 7]. Редукция $\mathrm{MO}(\Pr,M)$ становится возможной при введении некоторого функционала оценки информативности мотивов. *Эвристическая оценка информативности мотивов* $D\colon\mathrm{MO}\to\mathbb{R}_+$ может быть введена различными способами так, чтобы бóльшая «информативность» мотива соответствовала бóльшим значениям D.

Пусть $\mathrm{MO}(\Pr,M)$ — множество мотивов для заданных $\Pr$ и M, а $Q=Q(\Pr,M)$ — множество объектов. Каждый мотив $\mathrm{mo}\in\mathrm{MO}(\Pr,M)$ входит в состав N_Σ объектов из Q. При этом $N_\Sigma=\sum\limits_{l=1}^{m=|B|}N_l$, где N_l соответствует числу объектов $q=(\boldsymbol{a},b)$, у которых $b=b_l$, $b_l\in B$, так что мотиву mo_k поставлен в соответствие вектор $(N_1^k,\ldots,N_m^k,N_\Sigma^k)$. *Частота встречаемости* каждого значения $b_l\in B$ определяется как $\nu_l=\frac{N_l}{N_\Sigma}$ и, таким образом, $\mathrm{mo}_k\to$ $\to(\nu_1^k,\ldots,\nu_m^k,N_\Sigma^k)$.

Пусть частоты встречаемость литер $b_l\in B$ во всем множестве объектов Q составляют $(\nu_1^0,\ldots,\nu_m^0)$. «Информативность» мотива mo_k по данному b_l пропорциональна $|\nu_l^k-\nu_l^0|$: т. е. чем более информативен мотив по b_l, тем сильнее отличается ν_l^k от ν_l^0 — частоты b_l в среднем по Q. Тогда D_l^k, оценку информативности k-го мотива по b_l, естественно

определить как V-образную функцию с единственным минимумом при $\nu_l^k = \nu_l^0$ и такую, что $D_l^k = 1$ при $\nu_l^k = 1$ и при $\nu_l^k = 0$. Используя введенные обозначения, можно предложить по меньшей мере три способа оценки информативности k-го мотива:

$$D(k) = \sum\nolimits_{l=1}^{m} D_l^k;$$
$$D'(k) = N_\Sigma D(k) = N_\Sigma \sum\nolimits_{l=1}^{m} D_l^k;$$
$$D''_{D_0}(k) = \begin{cases} N_\Sigma, & \text{при } D(k) > D_0; \\ 0, & \text{при } D(k) \leqslant D_0. \end{cases}$$

Пусть D — эвристическая оценка информативности мотивов, $D\colon \mathrm{MO} \to \mathbb{R}_+$. Тогда любые два мотива $(\hat{m}_1, \boldsymbol{v_1})$ и $(\hat{m}_2, \boldsymbol{v_2})$ могут быть упорядочены в соответствии со значениями $D_1 = D(\hat{m}_1, \boldsymbol{v_1})$ и $D_1 = D(\hat{m}_2, \boldsymbol{v_2})$. Перенумеруем все элементы множества мотивов $\mathrm{MO}(\mathrm{Pr}, M)$ так, чтобы линейный порядок мотивов соответствовал убыванию значений D: $\mathrm{mo}_1, \ldots, \mathrm{mo}_k, \ldots, \mathrm{mo}_{|\mathrm{MO}|}$, $D(\mathrm{mo}_k) \geqslant D(\mathrm{mo}_{k+1})$. Пусть на данном множестве мотивов выполнено условие разрешимости (6). Определим функцию $K(i,j)$ находящую такой мотив с максимальным D (и, следовательно, с минимальным номером мотива k), который позволит различить i-ый и j-ый объекты из Q:

$$K(i,j) = \min_{k=1,\ldots,|\mathrm{MO}|} k : (\mathrm{mo}_k \in \bar{v}_i) \neq (\mathrm{mo}_k \in \bar{v}_j). \tag{7}$$

С использованием (i,j) становится возможным определить минимальное множество мотивов $\mathrm{MO}^0 \subseteq \mathrm{MO}(\mathrm{Pr}, M)$ на котором сохраняется разрешимость для данных Pr и M. Определим *характеристическую функцию* MO^0 следующим образом:

$$T(k) = \begin{cases} 1, & \text{если } \underset{Q}{\exists}(i,j)\colon (K(i,j) = k); \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{8}$$

Приложение формализма к тестовым выборкам экспериментальных данных

Использованные множества прецедентов выбирались случайным образом из 150 000 прецедентов в базе данных PDB [8]. Выбиралось 200–300 прецедентов, выбранное Pr разбивалось на список объектов, проводилась проверка непротиворечивости Pr и Q на основе критерия разрешимости в локальной форме (127),(3) и объекты, вызывающие нарушение условия разрешимости, удалялись. Для вычисления характеристических функций $T(k)$ в Q отбиралось 10 000, 18 000, 25 000 или 50 000 объектов. В общей сложности было проанализировано 40 различных Pr, по 10 для каждого из четырех приведенных выше значений $|Q|$.

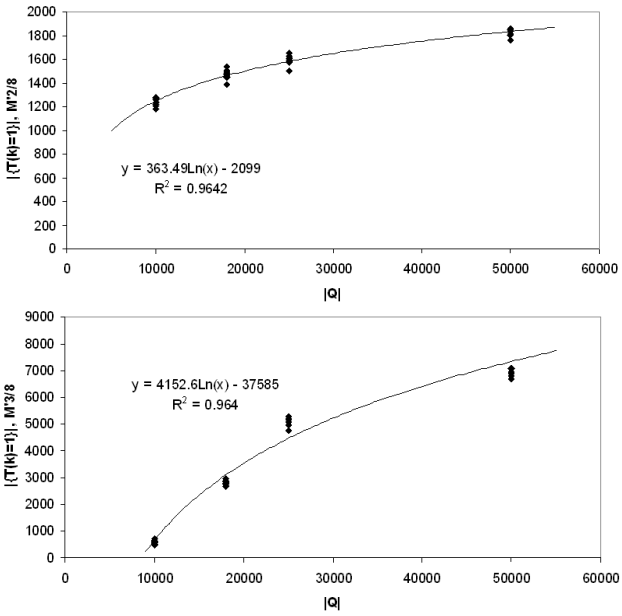


Рис. 1. Зависимость числа отобранных мотивов от размера выборки объектов. Вверху результаты для M'^2_8; внизу результаты для M'^3_8.

Каждая из *использованных систем масок* имела фиксированную размерность всех масок. Максимальная протяженность масок во всех системах составила 8 позиций. Изученные системы масок были получены на основе системы масок с размерностью всех масок равной 2 (система M_8^2) и размерностью 3 (M_8^3). Очевидно, что $|M_8^2| = C_8^2 = 28$ и $|M_8^3| = C_8^3 = 56$. Была произведена частичная редукция систем масок путем удаления сдвиг-эквивалентных масок. Для вычисления $T(k)$ использовались системы масок M'^2_8, $|M'^2_8| = 11$ и M'^3_8, $|M'^3_8| = 25$.

Была исследована целесообразность использования трех *эвристических оценок информативности мотивов* $D(k)$, $D'(k)$ и $D''_{D_0}(k)$. Предварительные эксперименты показали, что функционал $D'(k) = N_\Sigma D(k)$ приводит к тупиковым множествам мотивов наименьшей размерности, так что в дальнейших экспериментах использовался $D'(k)$.

Вычисления $T(k)$ показали, что настоящий формализм позволяет значительно сократить множество мотивов $\mathrm{MO}(\mathrm{Pr}, M)$ без потери разрешимости. Логарифмический характер зависимости числа отобранных мотивов от $|Q|$ (рис. 1) позволяет предположить, что высокая эффективность редукции сохранится и при значительно бóльших Q.

Так, в $\mathrm{MO}\big(\mathrm{Pr}(|Q| = 50\,000), M'^2_8\big)$ содержалось 4400 мотивов. Число отобранных мотивов (т. е. с $T(k) = 1$) составило около 1800. Результаты для системы масок большей размерности еще более впечатляют: в $\mathrm{MO}(\mathrm{Pr}(|Q| = 50\,000), M'^3_8)$ содержалось около 125 000 мотивов, отобрано — менее 7000.

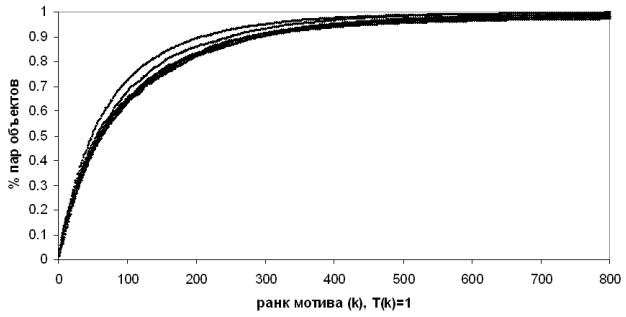


Рис. 2. Ранк мотивов и число распознаваемых пар объектов (на примере $|Q| = 50\,000,\ M'^2_8$).

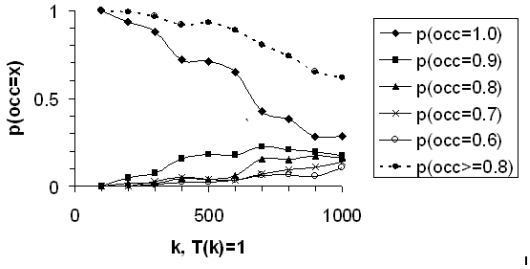


Рис. 3. Информативность и заполненность мотивов ($|Q| = 50\,000,\ M'^2_8$).

Отдельные мотивы в $\{T(k) = 1\}$ распознавали не более 1–2% объектов. Однако, во всех исследованных $|Q|$ на M'^2_8, первые 800–1000 мотивов с самими высокими k позволили распознать 99% пар объектов (рис. 2), т. е. возможно дальнейшее значительное сжатие множества мотивов с потерей разрешимости только на 1% пар объектов.

Приведенные выше результаты соответствуют нахождению минимального числа мотивов в произвольных обучающих выборках. Представляет интерес изучить *заполненность* (англ. *occupancy*) мотивов в разных Pr. Сравнение множеств мотивов полученных на различных Pr (например, 10 Pr с $|Q| =$ $= 50\,000$, рис. 3) показало: чем выше информативность мотива (т. е. чем ниже k), тем более вероятно, что мотив входит в тупиковое $\text{МО}^{\intercal}$, построенное на произвольном Pr. Так, 95% наиболее информативных мотивов ($k < 500$) в произвольном Pr также будут наиболее информативным и по крайней мере для 80% других Pr того же размера (см. кривую p(occ>=0.8) на рис. 3).

Выводы

В настоящей работе проведено развитие формализма для исследования разрешимости задачи распознавания вторичной структуры белках на множествах аминокислотных мотивов. Показано, что введение порядка на множестве мотивов посредством функционалов информативности позволяет проводить эффективное сокращение этого множества без потери разрешимости задачи. Отбор наиболее информативных мотивов необходим для следующего этапа настоящего исследования — синтеза алгоритмов в рамках алгебраического подхода к распознаванию.

Литература

[1] *Torshin I. Y.* Bioinformatics in the Post-Genomic Era: The Role of Biophysics. – NY: Nova Biomedical Books, 2006.

[2] *Рудаков К. В., Торшин И. Ю.* О разрешимости формальной задачи распознавания вторичной структуры белка // Всеросс. конф. ММРО-14, Суздаль, 2009. — С. 596–597.

[3] *Рудаков К. В., Торшин И. Ю.* Вопросы разрешимости задачи распознавания вторичной структуры белка // Информатика и её применения. — 2010. — Т. 4, № 2. — С. 25–35.

[4] *Журавлёв Ю. И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Проблемы кибернетики: Вып. 33. Москва: Наука — 1978. — С. 5–68.

[5] *Журавлёв Ю. И, Рудаков К. В.* Об алгебраической коррекции процедур обработки (преобразования) информации // Проблемы прикладной математики и информатики, Москва: Наука — 1987. — С. 187–198.

[6] *Рудаков К. В.* Универсальные и локальные ограничения в проблеме коррекции эвристических алгоритмов // Кибернетика. — 1987. — № 2. — С. 30–35.

[7] *Рудаков К. В.* О проблемах классификации значений признаков в задачах распознавания // Международная конференция «Интеллектуализация обработки информации» (ИОИ-8), Пафос, 2010. — С.?.

[8] *Berman H. M., Henrick K., Nakamura H.* Announcing the worldwide Protein Data Bank // Nature Structural Biology. — 2003. — Vol. 10, No. 12. — Pp. 980–982.

Профильно-статистическая основа локальных сигналов в ДНК

Чалей М. Б.[1]***, Кутыркин В. А.***[2]
maramaria@yandex.ru, vkutyrkin@yandex.ru
[1]Пущино, Учреждение Российской Академии наук Институт математических проблем биологии РАН
[2]Москва, Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана

Оригинальные методы распознавания нового типа скрытой периодичности в ДНК — скрытой профильной периодичности (скрытой профильности) — используются для поиска локальных особенностей структуры генов. Скрытая профильность в кодирующих районах ДНК коррелирует с особенностями структуры кодируемых белков.

Profile-statistical basis for local signals in DNA

Chaley M. B.[1]***, Kutyrkin V. A.***[2]
[1]Institute of mathematical problems of biology RAS, Pushchino, Russia
[2]N. E. Bauman Moscow state technical university, Moscow, Russia

Original methods recognizing new type of DNA latent periodicity, called latent profile periodicity (latent profility), are used to search local particularities of gene structures. In coding DNA regions the latent profility is correlated with the structure of their encoded proteins.

В последние годы технология секвенирования геномов организмов или, иными словами, расшифровка текста, определяющего генетическую наследственность организма, стала почти рутинным процессом. Так, к началу 2010 года база данных GenBank содержала уже более 1000 полностью расшифрованных геномов прокариотических организмов: бактерий и археобактерий, а число геномов эукариот (среди которых растения и животные), близких к завершению, составило более 380 [1]. Каждые полтора года происходит удвоение объема базы GenBank, где сейчас представлены данные о более 300 000 видах организмов.

Вместе с генетическими данными накапливаются и данные о первичных последовательностях кодируемых белков, их функциях, пространственных структурах, локальных особенностях, участии в механизмах белок-белковых взаимодействий, являющихся важнейшей особенностью организации и регуляции клетки.

Учитывая, что в геноме только одного организма насчитывается порядка тысяч различных генов, из-за экспоненциального роста потока данных о последовательностях генов и белков экспертам все больше приходится полагаться на теоретические методы предсказания их структуры и функций. Разработка математических методов и алгоритмов для автоматической аннотации биологических последовательностей приобретает всё большую значимость.

При формальном подходе ДНК рассматривают как текстовую строку в алфавите из четырёх букв, каждая из которых соответствует одному из типов азотсодержащих циклических соединений, входящих в состав нуклеотидов (нукл.) — мономерных звеньев реальной полимерной молекулы дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК).

Настоящая работа показывает возможность выявления сигналов о локальных особенностях в структуре генов и кодируемых ими белков на основе скрытой профильной периодичности (скрытой профильности).

Понятие скрытой профильности в последовательностях ДНК было введено в [2]. Это понятие расширяет понятие размытого тандемного повтора, в котором текстовая строка представлена последовательностью размытых копий (с идентичностью около 80%) текстового паттерна. Паттерн скрытой профильности может быть описан с помощью конечной случайной строки, состоящей из независимых случайных букв с соответствующими распределениями вероятностей для текстовых букв из алфавита ДНК. Известные методы, применявшиеся для распознавания размытых тандемных повторов [3, 4], не могут быть использованы для выявления этого нового типа скрытой периодичности.

В настоящей работе используются методы распознавания скрытой профильной периодичности, основанные на спектрально-статистическом подходе (2C подходе) [5].

В работе приведены примеры, когда скрытая профильность, выявленная в кодирующих районах ДНК, транслируется в особенности структуры белка. Непосредственное выявление таких особенностей является достаточно сложной задачей, поскольку цель поиска априори не известна.

Методы распознавания скрытой профильности в ДНК

Пусть $\mathrm{Chr}(\mathbf{p})$ — случайная буква со столбцом частот $\mathbf{p} = (p^1, \ldots, p^K)^{\mathsf{T}}$, которая является случайной величиной, принимающей с вероятностью p^i

$(i = 1, \ldots, K)$ значение i-й буквы алфавита $A = \langle a_1, \ldots, a_K \rangle$.

Последовательности ДНК рассматриваются как текстовые строки в четырёхбуквенном $(K = 4)$ алфавите $A = \langle a, g, t, c \rangle$, где a — аденин, g — гуанин, c — цитозин, t — тимин.

Специальная случайная строка $\mathrm{Str} = \mathrm{Str}_n(\pi) = \mathrm{Chr}(\mathbf{p}_1) \ldots \mathrm{Chr}(\mathbf{p}_n)$ из n независимых случайных букв индуцируется матрицей $\pi = (\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n) = (\pi^i_j)^K_n$, называемой n-профильной матрицей. Любое целое число L из диапазона $1, \ldots, L_{\max}$, где $L_{\max} \backsim \frac{n}{5K}$, называется тест-периодом строки Str. Букву $a_i \in A$ можно отождествить со случайной буквой, все компоненты столбца частот которой — нулевые, за исключением i-й единичной компоненты. Поэтому любую текстовую строку в алфавите A можно отождествлять с соответствующей специальной случайной строкой той же длины.

Пусть L — тест-период, $0 \leqslant M < L$ и $\mathrm{Str} = \mathrm{Str}_n(\pi) = \mathrm{Str}_L(\pi_1) \ldots \mathrm{Str}_L(\pi_m)\, \mathrm{Str}_M(\pi_{m+1})$ — разложение строки Str на подстроки длины L. Тогда, если $M = 0$, матрица $\Pi_{\mathrm{Str}}(L) = \frac{1}{m} \sum\limits_{i=1}^{m} \pi_i$ называется L-профильной матрицей строки Str. Если $M \neq 0$, то в матрицу $\Pi_{\mathrm{Str}}(L)$ вносятся соответствующие поправки. Таким образом, для строки Str введён профильно-матричный спектр Π_{Str}, определённый на каждом тест-периоде. Если $\pi_1 = \cdots = \pi_m = \pi_0$ и $\pi_0 = (\pi_{m+1}, \pi_{01})$, то строка Str называется L-профильной строкой со случайным паттерном периодичности $\mathrm{Str}_L(\pi_0)$. В этом случае для строки Str используется обозначение $\mathrm{Tdm}_L(\pi_0, n)$, и матрица π_0 называется её главной профильной матрицей, поскольку она индуцирует весь профильно-матричный спектр этой строки.

Далее str — текстовая строка длины n в алфавите A, анализируемая на наличие скрытой профильности, и $\mathrm{Tdm}_\Lambda = \mathrm{Tdm}_\Lambda(\Pi_{\mathrm{Str}}(\Lambda), n)$, где Λ — тест-период строки str. Для оценки её предполагаемого скрытого периода используется характеристический спектр H, принимающий на тест-периоде λ значение

$$H(\lambda) = \psi\big(\Pi_{\mathrm{str}}(\lambda), \Pi_{\mathrm{Tdm}_1}(\lambda), n\big) - E\big(\chi^2_{(K-1)\lambda}\big), \quad (1)$$

где $E(\chi^2_N)$ — математическое ожидание χ^2-распределения с N степенями свободы и, если Λ — тест-период строки str, $\Pi_{\mathrm{str}}(\lambda) = (\pi^{*i}_j)^K_\lambda$ и $\Pi_{\mathrm{Tdm}_\Lambda}(\lambda) = (\pi^i_j)^K_\lambda$, то

$$\psi\big(\Pi_{\mathrm{str}}(\lambda), \Pi_{\mathrm{Tdm}_\Lambda}(\lambda), n\big) = \frac{n}{\lambda} \sum_{j=1}^{\lambda} \sum_{i=1}^{K} \frac{(\pi^{*i}_j - \pi^i_j)^2}{\pi^i_j} \backsim \chi^2_{(K-1)\lambda}. \quad (2)$$

Первый тест-период L с ярко выраженным максимальным значением спектра H служит оценкой скрытого периода в строке str (см. Рис. 1). Он признаётся периодом скрытой профильности, если строка str статистически неотличима от (является реализацией) L-профильной строки Tdm_L. Для проверки статистической неотличимости используется статистика ψ (см. (2)) и спектр D_L отклонения строки str от L-профильности:

$$D_L(\lambda) = \frac{\psi\big(\Pi_{\mathrm{str}}(\lambda), \Pi_{\mathrm{Tdm}_L}(\lambda), n\big)}{\chi^2_{\mathrm{crit}}\big((K-1)\lambda, \alpha\big)}, \quad (3)$$

где $\chi^2_{\mathrm{crit}}(N, \alpha)$ — правостороннее критическое значение χ^2_N-распределения на уровне значимости $\alpha = 0{,}05$. Если $L_{\max} \backsim 100$, то гипотеза о неотличимости анализируемой текстовой строки str от профильной строки Tdm_L принимается, если на каждом тест-периоде $D_L < 1$. Если спектр D_1 отклонения от 1-профильности (однородности) строки str (см. (2) и (3)) повторяет спектр Th_L его теоретической реконструкции:

$$\mathrm{Th}_L(\lambda) = \frac{\psi\big(\Pi_{\mathrm{Tdm}_L}(\lambda), \Pi_{\mathrm{Tdm}_1}(\lambda), n\big)}{\chi^2_{\mathrm{crit}}\big((K-1)\lambda, \alpha\big)}, \quad (4)$$

то паттерн строки Tdm_L служит оценкой паттерна скрытой L-профильности.

Вместо спектра теоретической реконструкции (см. (4)) можно использовать статистическую реконструкцию St_L спектра D_1 (см. (3)) в предположении наличия скрытой L-профильности в анализируемой строке str. В этом случае, используя датчик случайных чисел, с помощью главной L-профильной матрицы $\Pi_{\mathrm{str}}(L)$ реализуется текстовая строка str^* длины n в алфавите A. Тогда значение спектра St_L на тест-периоде λ вычисляется по формуле:

$$\mathrm{St}_L(\lambda) = \frac{\psi\big(\Pi_{\mathrm{str}^*}(\lambda), \Pi_{\mathrm{Tdm}_1}(\lambda), n\big)}{\chi^2_{\mathrm{crit}}\big((K-1)\lambda, \alpha\big)}. \quad (5)$$

Статистическая реконструкция используется в том случае, когда регулярные минимумы спектра D_1 существенно отклоняются от нуля.

Результаты и обсуждение

В характеристических спектрах кодирующих районов наблюдается регулярность пиков в 3 нуклеотида (см. (1) и Рис. 1, 2). Таким образом проявляется первый уровень организации кодирования, обусловленный генетическим триплетным кодом. Такой феномен называется регулярной неоднородностью района, если в этом районе отсутствует скрытая 3-профильность. Именно этот случай регулярной неоднородности (см. Рис. 2) имеет место для всего кодирующего района гена *cya* бактерии *Bordetella pertussis* (GenBank Y00545, 981-6101 нукл.).

При наличии регулярной неоднородности, скрытая профильность выявляет второй уровень организации кодирования. На этот уровень организации указывают ярко выраженные максимумы

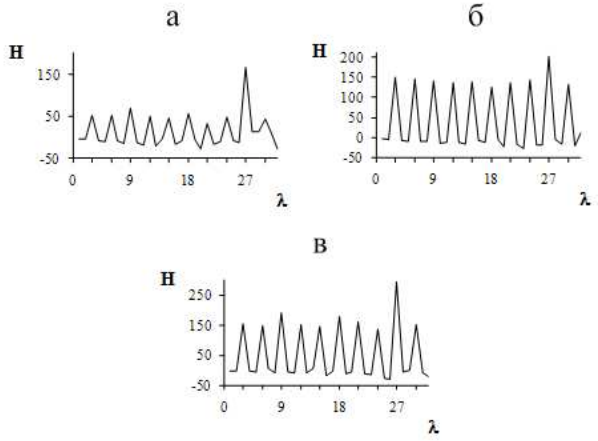


Рис. 1. Характеристические спектры трёх локальных областей кодирующего района гена *cya* бактерии *B. pertussis* (GenBank Y00545, 981–6101 нукл.): (**а**) 4020–4181 нукл., (**б**) 4443–5036 нукл., (**в**) 5211–5840 нукл.

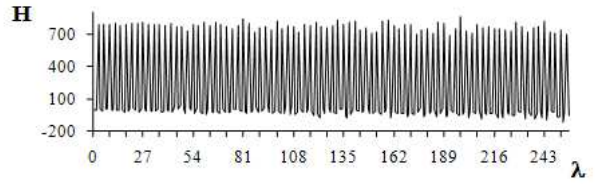


Рис. 2. Характеристический спектр кодирующего района гена *cya* бактерии *B. pertussis* (более подробное описание см. в тексте).

характеристических спектров локальных областей кодирующего района. В качестве примера, на Рис. 1 приведены характеристические спектры трёх локальных областей кодирующего района гена *cya B. pertussis*. Дальнейшее применение методов 2С подхода выявляет скрытую 27-профильность этих локальных областей. Рис. 3 иллюстрирует применение 2С подхода для одной из них (см. Рис. 1(в)). Согласно описанию белкового продукта гена *cya* бактерии *B. pertussis* — бифункциональной гемолизин/аденилат циклазы (Swiss-Prot P15318), именно в этих трёх областях находятся кальций связывающие сайты гемолизинового типа длиной 18 аминокислот, что в гене соответствует 54 нуклеотидам (2×27 нукл.).

Рассмотренный пример показывает возможность применения метода выявления скрытой профильности для поиска различных функциональных сайтов как в ДНК, так и в белках.

В качестве ещё одного примера двухуровневой организации кодирования рассмотрим последовательность кодирующего района гена *cwlG* (GenBank D45048, 1296–3938 нукл.) бактерии *Bacillus subtilis*. Согласно 2С подходу, в этой последовательности скрытая профильность распознаёт-

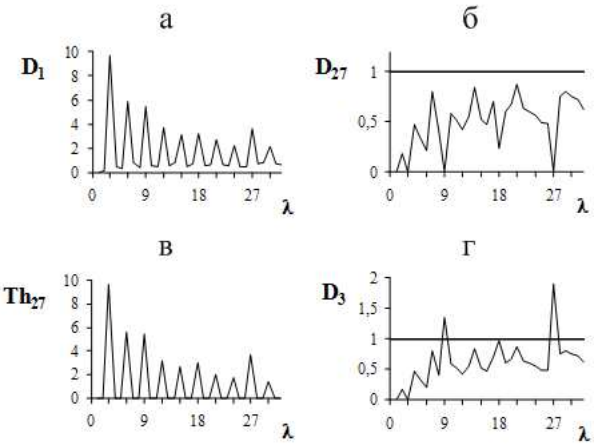


Рис. 3. Распознавание скрытой 27-профильности в локальной области кодирующего района гена *cya* бактерии *B. pertussis* (GenBank Y00545, 5211-5840 нукл., см. также Рис. 1(**в**)): (**а**,**б**,**г**) — спектры отклонения от 1-, 27-, 3-профильности (3), соответственно; (**в**) — теоретическая реконструкция (4) спектра D_1 в предположении скрытой 27-профильности анализируемой локальной области гена *cya*.

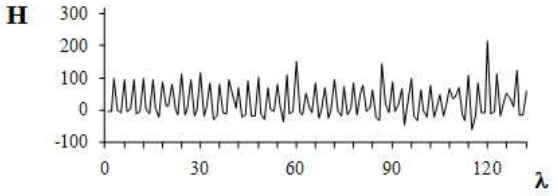


Рис. 4. Характеристический спектр кодирующего района гена *cwlG* эндо-β-1,4-глюкозаминидазы бактерии *B. subtilis*.

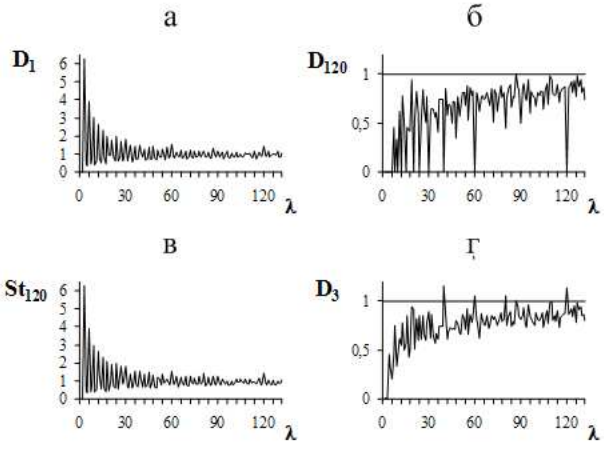


Рис. 5. Распознавание скрытой 120-профильности в кодирующем районе гена *cwlG B. subtilis*: (**а**, **б**, **г**) — спектры отклонения от 1-, 120-, 3-профильности (3), соответственно; (**в**) — статистическая реконструкция (5) спектра $\mathbf{D_1}$ в предположении скрытой 120-профильности анализируемого кодирующего района.

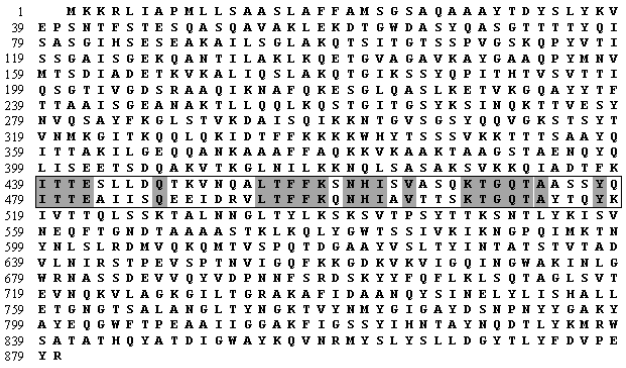


Рис. 6. Аминокислотный 40-профиль эндо-β-1,4-глюкозаминидазы показан в соответствии со скрытой профильностью в 120 нукл. кодирующего района гена *cwlG B. subtilis*. Аминокислоты записаны в однобуквенном коде. Рамка выделяет размытый повтор, в котором совпадают 53% аминокислот. Совпадения аминокислот в позициях повтора отмечены затемнёнными боксами.

ся только на тест-периоде 120 нукл. Этот вывод сделан на основе анализа спектральных параметров кодирующего района: характеристического спектра (см. Рис. 4), спектра отклонения от 120-профильности (см. Рис. 5(б)) и статистической реконструкции (см. Рис. 5(в)) спектра D_1 отклонения от однородности (см. Рис. 5(а)). Рис. 5(г) показывает отсутствие 3-профильности в анализируемом кодирующем районе гена *cwlG*.

Соответствующий вертикальный аминокислотный 40-профиль кодируемого белка — эндо-β-1,4-глюкозаминидазы, показан на Рис. 6. В этом профиле очевиден размытый повтор (53% гомологичных позиций) в 12-й и 13-й строках (439–518 а.к.). Повтор выделен на рисунке рамкой и ранее был описан в базе данных Swiss-Prot (P39848). Выше повтора находится SPOR домен (Sporulation related domain, 235–306 а.к.), ниже — LytD район (630–880 а.к.), содержащий два известных функциональных домена: бактериальный SH3 домен (638–685 а.к.) и каталитический домен глюкозаминидазы (Glucosaminidase, 735–860 а.к). Возможно, что сигнал локальной 120-профильности в гене *cwlG*, при трансляции в белковую последовательность, служит не только для разграничения различных функциональных районов белка.

Рассмотренные выше примеры являются иллюстрацией общего феномена корреляции между наличием в кодирующих районах последовательностей ДНК скрытой профильной периодичности и особеностями структуры и функций кодируемых белков.

Выводы

В работе предложены методы распознавания нового типа скрытой периодичности — скрытой профильности в ДНК. В кодирующих районах ДНК скрытая профильность позволяет различать два уровня организации кодирования генетической информации. Во многих случаях выявляемый методами Фурье-анализа первый уровень (уровень триплетного кодирования) отражает феномен регулярной неоднородности в последовательностях ДНК. Второй уровень организации кодирования, обусловленный скрытой профильной периодичностью последовательности ДНК, может коррелировать с особенностями структуры кодируемых протеинов. Такую взаимосвязь возможно использовать для разработки алгоритмов автоматизированного поиска сигналов о локальных функциональных районах в белках.

Литература

[1] *Benson D.A., Karsch-Mizrachi I., Lipman D., Ostell J., Sayers E.W.* GenBank // Nucleic Acids Research. — 2010. — Vol. 38, Database issue. — Pp. D46–D51.

[2] *Chaley M.B., Kutyrkin V.A.* Model of perfect tandem repeat with random pattern and empirical homogeneity testing poly-criteria for latent periodicity revelation in biological sequences // Mathematical Biosciences. — 2008. — Vol. 211, No. 1. — Pp. 186–204.

[3] *Chaley M.B., Nazipova N.N., Kutyrkin V.A.* Statistical methods for detecting latent periodicity patterns in biological sequences: The case of small-size samples // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2009. — Vol. 19, No. 2. — Pp. 358–367.

[4] *Chaley M., Nazipova N., Teplukhina E., Tyulbasheva G., Kutyrkin V.* Statistical methods for detecting latent periodicity in biological sequences: Solving a problem of small-size samples // IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine, Los Alamitos: IEEE Computer Society, 2009. — Pp. 92–96.

[5] *Чалей М. Б., Кутыркин В. А.* Скрытая профильная периодичность как новый тип периодичности генома // Всероссийская конференция Математические методы распознавания образов (ММРО-14), Москва: МАКС Пресс, 2009. — С. 614–617.

Application of monotonic correction to learning to rank

Spirin N. V.
nikita.spirin@phystech.edu
Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Russia

Learning to rank is one of the hottest problems in web search. A lot of successful algorithms solving this problem have been proposed over the last decade. One of the most popular approach is an application of boosting techniques to learning to rank. The general idea of boosting is to build a large set of weak rankers and then combine them efficiently in a *linear* composition. Despite the fact that this method is generally successful for applications, it isn't effective when used to boost the performance of individually strong algorithms. To address this problem we propose a novel algorithm, that is able to blend base rankers efficiently, based on a theory of compositions with *nonlinear* monotonic correcting functions. In this paper we also provide an auxiliary algorithm to monotonize a set of vectors — a subproblem which is necessary to solve before building a monotonic composition. Experiments with real data show that our achieves high accuracy and outperforms existing state-of-the-art algorithms.

The learning to rank problem

A retrieval system functions as follows. Given a query and a trained ranking function, an IR system returns a list of documents that are somehow related to the query and sorted in descending order of relevance according to the ranking function. The latter is formed during the learning stage. As a training set we have a set of queries and documents associated with them. In addition to that, for each query-document pair from this set there is a relevance score. Relevance scores form an ordered set and indicate the level of usefulness of a document to a query. According to the general machine learning approach the objective of *learning to rank* (L2R) is to synthesize the ranking function that maximizes a performance measure.

If stated formally, the structure of the training set looks as follows. Given an ordered set of ranks $\mathbb{Y} = \{r_1, \dots, r_K\}$ and a set of queries $Q = \{q_1, \dots, q_n\}$. A list of documents $D_q = \{d_{q1}, \dots, d_{q,n(q)}\}$ is associated with each query $q \in Q$, where $n(q)$ is the number of documents associated with the query q. A factor ranking model is admitted, i.e. each query-document pair (q, d), $d \in D_q$ is represented by the vector of features $\boldsymbol{x}_{qd} = \big(f_1(q,d), \dots, f_m(q,d)\big) \in \mathbb{R}^m$ and the corresponding relevance score $r(q,d) \in \mathbb{Y}$. Finally, the training set can be represented as

$$S = \{\boldsymbol{x}_{qd}, r(q,d)\}, \quad q \in Q,\ d \in D_q.$$

The objective is to build a ranking function $A\colon \mathbb{R}^m \to \mathbb{Y}$ that maximizes a performance measure on the training set and on a new testing dataset as well.

Monotonic correcting functions

Monotonicity restriction is very natural to impose on correcting function that aggregate outputs of weak base predictors [3, 6]. Indeed, if output of a predictor is higher for an object, provided that outputs of other predictors are the same, then the output of the entire composition must be also higher for this object. This implies that the correcting function is to be monotonic. Obviously, linear composition (weighted voting) meets the monotonicity restriction if only all the weights are nonnegative. Monotonicity is a less restrictive principle than the weighted voting is. Moreover, monotonic correcting function is more flexible in case of L2R, and allows to build small compositions of strong rankers more efficiently. In this section we restate the general framework of monotonic compositions in case of classification and regression [3]. Later we will adapt it for learning to rank.

Let Ω be an object space, X and Y be partially ordered sets, B be a set of base algorithms $b\colon \Omega \to X$, X is referred to as an estimation space (predictions of base algorithms) and Y as an output space (labels, responses, relevance scores, etc.).

A training set of object–output pairs $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^{\ell}$ from $X \times Y$ and a set of base algorithms $b_1, \dots, b_p$ induces a sequence of estimation vectors $\{\boldsymbol{u}_k\}_{k=1}^{\ell}$ from X^p, where $\boldsymbol{u}_k = \big(u_k^1 = b_1(x_k), \dots, u_k^p = b_p(x_k)\big)$.

Define an order on X^p: $(u^1, \dots, u^p) \leqslant (v^1, \dots, v^p)$, if $u^i \leqslant v^i$ for all $i = 1, \dots, p$. If $\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{v}$ and $\boldsymbol{u} \leqslant \boldsymbol{v}$, then $\boldsymbol{u} < \boldsymbol{v}$. A map $F\colon X^p \to Y$ is referred to as monotonic, if $\boldsymbol{u} \leqslant \boldsymbol{v}$ implies $F(\boldsymbol{u}) \leqslant F(\boldsymbol{v})$ for all $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in X^p$.

Monotonic composition of base algorithms $b_1, \dots, b_p$ with *monotonic correcting function* F is a map $a\colon \Omega \to Y$ defined as $a(x) = F\big(b_1(x), \dots, b_p(x)\big)$ for all $x \in \Omega$.

If the base algorithms are fixed, then the learning of function F from data can be stated as a task of monotonic interpolation. Given a sequence of vectors $\{\boldsymbol{u}_k\}_{k=1}^{\ell}$ from X^p and a sequence of targets $\{y_k\}_{k=1}^{\ell}$ from Y, one should build such a monotonic function F that meets the *correctness condition*

$$F(\boldsymbol{u}_k) = y_k, \quad k = 1, \dots, \ell. \tag{1}$$

Sequence of pairs $\{(\boldsymbol{u}_k, y_k)\}_{k=1}^{\ell}$ is called monotonic, if from $\boldsymbol{u}_i < \boldsymbol{u}_j$ follows $y_i \leqslant y_j$ for all $i, j = 1, \dots, \ell$. Obviously, a monotonic function F meeting the condition (1) exists **iff** the sequence $\{(\boldsymbol{u}_k, y_k)\}_{k=1}^{\ell}$ is monotonic.

A pair (i, j) is called *defective* for the base algorithm b, if $b(x_i) \geqslant b(x_j)$ and $y_i < y_j$.

Denote a set of all defective pairs of b as $\mathbb{D}(b)$.

Международная конференция «Интеллектуализация обработки информации» (ИОИ-8), Кипр, г. Пафос, 17–24 октября 2010 г.
International conference "Intelligent Information Processing" IIP-8, Cyprus, Paphos, October 17–24, 2010.

A set $\mathbb{D}(b_1,\dots,b_p) = \mathbb{D}(b_1)\cap\dots\cap\mathbb{D}(b_p)$ is called *cumulative defect* of a set of base algorithms $(b_1,\dots,b_p)$.

The number of defective pairs $|\mathbb{D}(b)|$ play a role of a quality measure for a base algorithm b.

In composition, if we build the next base algorithm b_{p+1} so that it yields a right order on pairs (i,j) from cumulative defect of preceding base algorithms,

$$b_{p+1}(x_i) < b_{p+1}(x_j) : \ (i,j) \in \mathbb{D}(b_1,\dots,b_p), \qquad (2)$$

then $\mathbb{D}(b_1,\dots,b_p,b_{p+1}) = \varnothing$, and a monotonic function F meeting (1) will exist.

The more accurate analysis of the difference between two sets $\mathbb{D}(F(b_1,\dots,b_p)) \setminus \mathbb{D}(b_1,\dots,b_p)$ show that not only the cumulative defect but also defective pairs constituting the so called defective triplets impede the correctness condition [3]. Any defective triplet contains a defective pair from cumulative defect, however, a defective pair may induce many defective triplets. Thus, the system (2) acquires weights w_{ij} for each inequality $(i,j) \in \mathbb{D}(b_1,\dots,b_p)$. The task is to find the heaviest consistent sub-system of inequalities. Below we restate this problem in terms of quality functional and analyze its properties for L2R problem.

The MonoRank algorithm

Inspired by outstanding performance of monotonic compositions on classification and regression problems [3, 6], we applied the notion of monotonic correction to L2R problem and developed a novel algorithm for it. The algorithm is referred to as MonoRank and the pseudocode is presented in Algorithm 1.

In order to adapt the optimization task stated in [3] to L2R we substitute query-document pairs (q,d) and (q,d') for objects x_i, x_j respectively, and then restate the problem in question as a minimization of quality functional $\mathscr{Q}$ with base algorithms $b_1,\dots,b_p$ fixed:

$$\mathscr{Q}(b_1,\dots,b_p,b_{p+1}) = \sum_{q\in Q}\sum_{(d,d')} w_{qdd'}\big[b_{p+1}(q,d) \geqslant b_{p+1}(q,d')\big] \to \min_{b_{p+1}}, \qquad (3)$$

where (d,d') are all documents from the list D_q such that $(d,d') \in \mathbb{D}(b_1,\dots,b_p)$.

In classification and regression tasks special efforts are to be made to reduce the pairwise criterion $\mathscr{Q}$ to usual pointwise empirical risk [3]. In learning to rank such tricks are needless as long as base rankers can be learned directly from $\mathscr{Q}$ minimization, particularly in pairwise approach.

Base rankers for monotonic correction

Having analyzed successful L2R algorithms, in this section we present their modifications to be used in monotonic compositions. The general idea is to use weights $w_{qdd'}$ for pairs of documents.

The weighted-RankSVM algorithm. Insertion of weights in RankSVM algorithm doesn't face any difficulties [2]. The only thing to do is to add weights $w_{qdd'}$ whenever we come across slack variables in the objective function. In this case the classical SVM quadratic programming task will look like

$$\min_{\alpha,\,\{\xi_{qdd'}\}} \|\boldsymbol{\alpha}\|^2 + C\sum_{q\in Q}\sum_{d,d'\in D_q} w_{qdd'}\xi_{qdd'};$$
$$\boldsymbol{\alpha}^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{x}_{qd} - \boldsymbol{x}_{qd'}) \geqslant 1 - \xi_{qdd'},$$
$$\xi_{qdd'} \geqslant 0, \quad q \in Q;\ (d,d') \in D_q;.$$

To sum up, we append an additional vector of weights $\{w_{qdd'}\}$ as a parameter of the algorithm.

The weighted-RankBoost algorithm. RBoost already contains the distribution of weights $w_{qdd'}$ over the set of document pairs $q \in Q,\ d,d' \in D_q$. Usually the weights are initialized by the uniform distribution, and updated at each subsequent iteration t so that the weak ranker b_t focus more on the document pairs that was ranked incorrectly by previous weak rankers. See the original text for additional information [1]. In order to use RankBoost in monotonic composition we propose to initialize RankBoost by normalized weights $w_{qdd'}$ from (3) instead of uniform distribution.

Other L2R algorithms from pairwise family can be modified analogously to be used as base rankers for monotonic composition. For example, weights $w_{qdd'}$ can be easily inserted in FRank [4] and RankNet [7].

Algorithms from pointwise family, e. g. McRank [8], can be modified by introducing document weights $w_{qd} = \sum_{d'\in D_q} w_{qdd'} + w_{qd'd}$.

Reweighing strategies

Now let us discuss the initialization of weights $w_{qdd'}$ for algorithms described above in order for them to form a strong and diversified set of base rankers. Particularly, below we will describe various reweighing strategies.

Algorithm 1. MonoRank pseudocode.

Input: training set $S = \{\boldsymbol{x}_{qd}, r(q,d)\}, q \in Q, d \in D_q$;
δ — number of unsuccessful iterations before stop;
Output: ranking composition $M_T(q,d)$ of size T;
initialize weights $w_{qdd'} = 1,\ q \in Q,\ d,d' \in D_q$;
for $t = 1,\dots,n$
  train base ranker $b_t(q,d)$ using weights $\{w_{qdd'}\}$;
  get predictions $b_t(q,d)$ of b_t on a training set S;
  monotonize $\big\{\big(b_1(q,d),\dots,b_t(q,d)\big), r(q,d)\big\}$;
  build a composition $M_t(q,d)$ of size t;
  $T = \arg\min\limits_{p:\ p\leqslant t} \mathscr{Q}(M_p)$;
  update $\{w_{qdd'}\}$ using M_t;
  if $t - T \geqslant \delta$ **then**
    return M_T;

The defective pairs minimization is the most natural strategy directly induced from the general theory of monotonic correcting functions:

$$w_{qdd'} = \begin{cases} 1, & (qd, qd') \in \mathbb{D}(b_1, \ldots, b_p); \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

where $d, d' \in D_q$. However, this approach has a significant shortcoming. If we train our base algorithms only using defective pairs the generalization ability of the entire algorithm will diminish and hence it won't be practically applicable.

The defective triplets minimization is almost the same strategy as the previous one and hence inherits all the shortcomings of it. The only difference is that weights might vary from pair to pair and are formed based on a notion of defective triplet [3]:

$$w_{qdd'} = \begin{cases} t^0_{qdd'} + \frac{1}{2} t_{qdd'} + 1, & (qd, qd') \in \mathbb{D}(b_1, \ldots, b_p); \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

where $t^0_{qdd'}$ is a number of strictly defective triplets containing the defective pair (qd, qd') and $t_{qdd'}$ is the corresponding number of defective triplets. Theoretically, in this case the weight $w_{qdd'}$ can be interpreted as as a more accurate estimate of the number of defective pairs from $\mathbb{D}(F(b_1, \ldots, b_p))$ that will be deleted if we turn out the defect on the pair (qd, qd'). This seems to be a sensible strategy. However, experiments show that it doesn't allow to gain any quality benefit and only increases the complexity of the algorithm. Our conclusion is in agreement with the related research for classification [6].

The defective and clean pairs minimization is the most successful strategy according to our experiments. It combines *the defect minimization principle* and *the struggle for generalization ability* for the entire algorithm [6].

Definition 1. *A pair (i, j) is clean for the base algorithm b, if $b(x_i) < b(x_j)$ and $y_i < y_j$. A set of all clean pairs of b will be denoted as $\mathbb{C}(b)$. A set of all clean pairs of a set of algorithms $(b_1, \ldots, b_p)$ equals $\mathbb{C}(b_1) \cap \cdots \cap \mathbb{C}(b_p)$ and will be denoted as $\mathbb{C}(b_1, \ldots, b_p)$.*

Note that in L2R framework the indexes i, j become qd, qd' respectively. Then the strategy will look like:

$$w_{qdd'} = \begin{cases} w_{\mathbb{D}}(t), & (qd, qd') \in \mathbb{D}(b_1, \ldots, b_p); \\ 1, & (qd, qd') \in \mathbb{C}(b_1, \ldots, b_p); \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

In this case the weight for a clean pair equals one. And the weight $w_{\mathbb{D}}(t)$ for a defective pair may depend on iteration $t = 1, \ldots, T$. Particularly, it may increase from iteration to iteration in order to lead the training algorithm to turn out the defect on these pairs. We tasted three variants of reweighing strategies in our experiments:

$$w_{\mathbb{D}}(t) = 1 \;\text{ or }\; (t-1) \;\text{ or }\; 2^{t-1}.$$

The strategy of increasing weights $w_{\mathbb{D}}(t)$ can be used to filter outliers in data. Specifically, if a pair continues to be defective for a considerable number of iterations and hence has a big weight we might remove this pair from our dataset and retrain the algorithm.

Monotonic correcting function

In this section we present a novel approach to blending base rankers $b_1, \ldots, b_p$ with nonlinear monotonic correcting function $F(b_1, \ldots, b_p)$. We will build our algorithm so as to minimize the quality functional induced by the cumulative defect $|\mathbb{D}(b_1, \ldots, b_p)|$. At first, it is worth noting that due to the structure of the training set comparable documents d, d' are only those which are associated with the same query, $d, d' \in D_q$, $q \in Q$. Another distinction from the classification case is that we don't really need to meet the correctness condition [3]. The only constraint to meet is to keep the right ordering of documents on the training set.

Provided that documents associated with different queries aren't comparable at all, the quality functional can be rewritten as the sum of functionals, counting defect only for a particular query. We will denote the defect of the entire algorithm with the correcting function F on the query q as $\mathscr{Q}_q(F)$. Then the optimal correcting function F must be a solution of minimization problem

$$\sum_{q \in Q} \mathscr{Q}_q(F) \to \min_F.$$

To give an approximate but computationally efficient solution of this hard problem we propose an averaging heuristic. We solve $|Q|$ problems separately

$$F_q = \arg\min_F \mathscr{Q}_q(F), \quad q \in Q.$$

and give a correcting function F by averaging all F_q:

$$F = \frac{\sum_{q \in Q} |D_q| F'_q}{\sum_{q \in Q} |D_q|}. \tag{4}$$

where F'_q is a normalized to $[0, 1]$ function F_q. Obviously, the function F is monotonic being the sum of monotonic functions.

For illustrative purposes we provide a picture of a monotonic correcting function for ranking, built in accordance with the theory described above and the averaging heuristic. Due to the large number of queries in a training set and hence due to averaging, the monotonic function from the fig. 1 looks like a plane. However, having changed the scale one can observe a complicated texture of the surface. According to our experimental analysis the increase in quality takes place directly thanks to this tiny asperities.

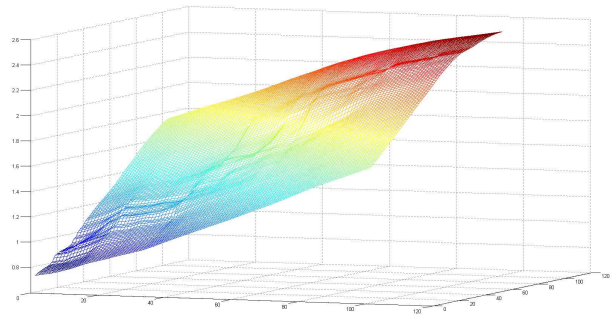


Fig. 1. Monotonic correcting function for ranking.

Experimental results

In this work we use two popular evaluation measures. The first one is the *Mean Average Precision (MAP)* and the second one is the *Discounted Cumulative Gain (DCG)*. RankSVM and RankBoost were used as baseline algorithms. We set the performance of base rankers (RankBoost or RankSVM) with the best values over the ensemble. The MonoRank was chosen from the set of all monotonic compositions of different sizes (number of base algorithms). The choice was guided by the maximum performance on the test set. We utilized a Yahoo! LETOR 2010 dataset [9]. This dataset contains 1266 unique queries, 34815 query-document pairs, 575 features of query-document pairs precomputed and normalized to $[0, 1]$, as well as relevance evaluation made by Yahoo! assessors. Relevance grades are in discrete range $[0, 4]$. We used 5-fold CV to calculate the performance of algorithms. As a base algorithm for MonoRank we used RankBoost due to its computational cost and quality. The results are reported in table 1.

Having seen the fig. 1 one might think why we should use so complicated correcting function to aggregate base rankers. Why couldn't we use just a simple or weighted voting of base rankers? Of course, these are reasonable speculations but we have set an experiment to test the hypothesis. We approximated our "wavy" surface with hyperplane by the least squares method and tested the algorithm on an independent testing set. The results are in table 2.

Conclusion

In this paper a new algorithm called MonoRank is proposed for the learning to rank problem. MonoRank is based on the theory of nonlinear monotonic correcting functions. In distinction from existing methods this algorithm can work as a universal wrapper, able to combine strong algorithms solving the L2R problem. Experimentally, MonoRank algorithm shows high accuracy in ranking and outperforms existing state-of-the-art algorithms, like RankBoost and RankSVM.

Table 1. Results summary.

Metric	MonoRank	RankBoost	RankSVM
MAP	**0.8941**	0.8888	0.8812
NDCG@1	**0.8149**	0.8029	0.8057
NDCG@3	**0.7783**	0.7424	0.7711
NDCG@5	**0.7754**	0.7692	0.7678
NDCG@10	**0.7973**	0.7935	0.7949

Table 2. Comparison of "wavy" monotonic correcting function with its linear approximation.

Metric	MonoRank	MonoRank-linearized
MAP	0.8941	**0.8968**
NDCG@1	**0.8149**	0.8106
NDCG@3	**0.7783**	0.7735
NDCG@5	**0.7754**	0.7720
NDCG@10	**0.7973**	0.7898

References

[1] *Freund Y., Iyer R. D., Schapire R. E., Singer Y.* An efficient boosting algorithm for combining preferences // Journal of Machine Learning Research. — 2003. — Vol. 4, — Pp. 933–969.

[2] *Joachims T.* Optimizing search engines using clickthrough data // SIGIR'08 Conference Proceedings, 133-142, 2002.

[3] *Vorontsov K. V.* Optimization methods for linear and monotone correction in the algebraic approach to the recognition problem // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2000. — Vol. 40. — Pp. 159–168.

[4] *Tsai M. F., Liu T. Y., Qin T., Chen H. H., Ma W. Y.* FRank: A Ranking Method with Fidelity Loss // SIGIR'07 Conference Proceedings, July 23–27, 2007, Amsterdam.

[5] *R. Schapire* The boosting approach to machine learning: An overview // MSRI Workshop on Nonlinear Estimation and Classification, Berkeley, CA, 2001.

[6] *Guz I. S.* Nonlinear monotonic compositions of classifiers // Proc. of 13-th Russian conference Mathematical Methods of Pattern Recognition (MMRO-13), Zelenogorsk, 2007.

[7] *Burges C., Shaked T., Renshaw E., Lazier A., Deeds M., Hamilton N., Hullender G.* Learning to Rank using Gradient Descent // In Proceedings of the 22nd International Conference on Machine Learning, 2005.

[8] *Li P., Burges C. J. C., Wu Q.* Learning to Rank Using Classification and Gradient Boosting // Proceedings of the 21st NIPS Conference, Vancouver, Canada, 2007.

[9] Yahoo Learning to Rank Challenge 2010. `http://learningtorankchallenge.yahoo.com/index.php`

Внедрение системы «Антиплагиат» в Российской государственной библиотеке*

Авдеева Н. В., Ботов П. В., Букаев А. С., Вислый А. И., Груздев И. А., Житлухин Д. А., Романов М. Ю., Чехович Ю. В.

diss@rsl.ru, chehovich@forecsys.ru

ФГБУ «Российская государственная библиотека»,

Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН, Компания Форексис

В докладе приведено описание внедрения системы «Антиплагиат» в Российской государственной библиотеке (РГБ). В рамках этого внедрения в РГБ установлена система поиска заимствований по базе электронных авторефератов и диссертаций. Приведено подробное изложение результатов внедрения, состав системы, вопросы безопасности и результирующие технические и скоростные характеристики.

On integration Antiplagiat system in Russian State Library*

Avdeeva N. V., Botov P. V., Bukaev A. S., Visly A. I., Gruzdev I. A., Zhitlukhin D. A., Romanov M. Y., Chekhovich Y. V.

Russian State Library, Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Forecsys Company

The report describes the implementation of the Antiplagiat system into the Russian State Library (RSL). As a result, the RSL acquired a system of searching for plagiarism againgst the digital dissertation and abstract base. The report gives details on the result of the implementation, the structure of system, security matter and its final technical and speed characteristics.

О системе «Антиплагиат»

Интернет-сервис `www.antiplagiat.ru` [1] был создан в 2005 г. для проверки текстовых документов на наличие заимствований из общедоступных сетевых источников [5]. Изначально система разрабатывалась для внедрения в высших учебных заведениях. Функциональное ядро системы «Антиплагиат» использует алгоритмы, разработанные сотрудниками ВЦ РАН и компании Форексис [6].

В сентябре 2005 года была запущена в эксплуатацию тестовая версия интернет-сервиса `www.antiplagiat.ru`. Впервые использование системы «Антиплагиат» было включено в обязательный учебный процесс ВУЗа в ноябре 2005 года. В 2006 году на пятом Конкурсе русских инноваций разработка получила приз Минсвязи РФ «За лучший проект в области телекоммуникаций». Летом 2006 года Советом Ассоциации негосударственных ВУЗов РФ принято решение рекомендовать членам Ассоциации применение сервиса. В июне 2007 года использование в ВУЗах интернет-сервиса `www.antiplagiat.ru` было рекомендовано Советом по качеству образования при Рособрнадзоре РФ. К июлю 2007 года была разработана адаптированная под нужды Высшей аттестационной комиссии (ВАК) Минобрнауки РФ система для обязательной проверки на плагиат всех диссертаций и авторефератов и начата ее эксплуатация.

Система «Антиплагиат» постоянно развивается и расширяет функциональность. Происходит совершенствование алгоритмов поиска для выдачи более корректных результатов. Так, в 2006 году была введена возможность развёртывания системы на оборудовании держателей документов; в 2007 году реализована поддержка распределённой проверки по совокупности коллекций документов; в 2008 году введено использование механизма «сигнальных статистик», подсказывающих пользователю, что в проверяемом документе есть признаки попыток «обхода» системы. Постоянно развивается и дорабатывается пользовательский интерфейс.

В настоящий момент система «Антиплагиат» используется несколькими десятками ВУЗов России. Создан специальный сайт именно для работы с ВУЗами [2]. Публичный интернет-сервис используют около 200 тысяч пользователей в России и за рубежом.

Внедрение системы в Российскую государственную библиотеку началось в первой половине 2008 г. Во второй половине 2008 г. открыт сайт для поиска по базе электронных документов РГБ [3]. В настоящий момент продолжается активное расширение функциональности системы и построение новых сервисов на её основе.

Задачи системы в РГБ

Российская государственная библиотека является уникальным хранилищем подлинников кандидатских и докторских диссертаций, защищенных в стране с 1944 года по всем специальностям, кроме медицины и фармации [4].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №08-07-00304, 10-07-00717) и гранта Президента РФ для поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук МК-7954.2010.9.

В 2003 году руководством РГБ было принято решение о необходимости обеспечения сохранности и, одновременно, широкой доступности фонда диссертаций на основе современных информационных технологий, что привело к созданию Электронной библиотеки диссертаций Российской государственной библиотеки (ЭБД РГБ). В этом же году был оцифрован стартовый пакет диссертаций по наиболее востребованным специальностям: «Экономические науки», «Юридические науки», «Педагогические науки», «Психологические науки» и «Философские науки» (всего около 28 000 полных текстов). Начиная с 2004 года, состав ЭБД РГБ пополнялся объемом диссертаций по всем специальностям (кроме медицины и фармации), что составляет около 30 000 — включая 20 000 кандидатских и 10 000 докторских — диссертаций в год. В рамках проекта ретроконверсии в 2006 году были оцифрованы все диссертации за 1985 год. А с 2007 года состав ЭБД РГБ пополняется всем объемом диссертаций, включая работы по медицине и фармации.

Сегодня Российская государственная библиотека предоставляет возможность доступа к более 580 000 полным текстам диссертаций и авторефератов, находящимся в электронной форме, что дает уникальную возможность многим читателям получить интересующую информацию, не покидая своего города. Для доступа к ресурсам ЭБД РГБ создаются Виртуальные читальные залы в библиотеках организаций, в которых и происходит просмотр электронных диссертаций и авторефератов пользователями.

Каталог Электронной библиотеки диссертаций РГБ находится в свободном доступе для любого пользователя Интернет по адресу `diss.rsl.ru`.

Изначально перед системой «Антиплагиат» стояла задача организации эффективного поиска заимствований всем полным текстам Электронной библиотеки диссертаций РГБ, а также построения различных сервисов на основе поискового движка. К числу этих сервисов относятся:

— предоставление ВУЗам и другим пользователям системы возможности проверки текстов по электронной библиотеке диссертаций Российской государственной библиотеки;
— реализация ядра системы «Научный поиск»;
— предоставление сотрудникам РГБ аналитических средств, обеспечивающих работу с метаданными хранилища диссертаций и авторефератов.

Состав системы «Антиплагиат.РГБ»

Система «Антиплагиат.РГБ» состоит из следующих модулей:

— хранилище документов (коллекция): содержит набор документов и необходимые индексы; позволяет осуществлять поиск по ним;
— модуль импорта из систем РГБ: позволяет по расписанию либо вручную загружать документы из источников РГБ в коллекцию «Антиплагиат»; поддерживает библиографический стандарт MARC; обнаруживает и корректно обрабатывает изменения в уже загруженных документах (то есть позволяет работать в режиме обновления метаданных);
— модуль доступа к внешним экземплярам системы «Антиплагиат»: позволяет извне проверять документы по базе диссертаций полных текстов диссертаций и авторефератов, а также проверять по внешним коллекциям из системы «Антиплагиат.РГБ»;
— пользовательский интерфейс в виде сайта `antiplagiat.rsl.ru`: предоставляет функциональность, сходную с общедоступным сервисом `www.antiplagiat.ru` для пользователей читальных залов;
— модуль предоставления функций системы «Антиплагиат» через WebService для внутреннего использования сотрудниками РГБ;
— модуль для аналитической обработки метаданных документов: предоставляет OLAP-куб с метаданными на Microsoft SQL Server 2005 для внутреннего использования сотрудниками РГБ, у которых появляется возможность построения сводных отчетов по любым имеющимся в системе атрибутам с различными вариантами агрегации (пример вывести средний процент цитирования у всех загруженных в систему статей по теме «Психология» с недельной агрегацией по дате публикации);
— модуль администрирования системы (веб-интерфейс): позволяет управлять правами доступа и настройками системы (такими, как импорт);
— модуль поддержки научного поиска: предоставляет расширенную функциональность доступа к ядру системы для потребностей научного поиска;
— модуль просмотра отчётов о проверке офлайн (Antiplagiat Report Viewer): позволяет экспортировать результаты проверки в специальный файл (контейнер), включающий в себя исходный документ, отчёт о проверке, а также специальные ключи, обеспечивающие подлинность просматриваемого файла.

Качество и скорость проверки

Система «Антиплагиат» изначально разрабатывалась для проверки больших объёмов текста, загружаемых пользователями сети интернет, в связи с чем она с самого начала оптимизировалась по времени работы; время проверки среднего документы ещё в 2005 году составляло несколько секунд. Со временем, благодаря открытой провер-

ке на прочность системы в сети интернет, открывались некоторые способы её «обхода» — способы автоматической или полуавтоматической переработки текста, после которых он не распознавался системой как списанный. Система шла в ногу со временем: при выявлении новых методов обхода они оперативно закрывались, что порой приводило к некоторому снижению производительности. В последних версиях был внедрён новый поисковый движок, уникальный индекс которого позволил решить проблемы производительности. Также теперь имеется возможность вручную управлять соотношением «размер/качество»: можно сделать индекс маленьким (при этом проверка текстов будет выполняться быстро, но некоторые мелкие фрагменты могут быть не замечены), а можно большим, обеспечив высокое качество проверки (потребуется больше дискового пространства и времени на проверку). Наконец, применение современных SSD-накопителей повысило скорость работы системы практически на порядок. Теперь время проверки составляет, в среднем, менее 1 секунды.

Интеграция различных коллекций документов

С развитием системы появилась возможность хранить отдельные независимые базы текстов — коллекции. Документ может проверяться как по одной, так и по нескольким коллекциям одновременно, что обеспечивает дополнительную гибкость при проверке. При подключении к системе различных организаций, для каждой из них заводится своя коллекция. После этого держатель коллекции может распоряжаться этой коллекцией по своему усмотрению: предоставлять доступ к ней другим пользователям, определять правила работы со своей коллекцией (например, можно ли будет им скачивать из неё документы или же использовать только для поиска цитирования без явной загрузки документов).

В Российской государственной библиотеке система работает на выделенном сервере, который находится в ведении Комплекса информационных технологий РГБ. Таким образом, любой запрос на проверку по базе диссертаций и авторефератов автоматически направляется пользовательской системой на центральный шлюз «Антиплагиат», который уже разбирает запрос и переадресует его на систему, расположенную в РГБ. Результаты проверки, аналогичным образом, через центральный шлюз доставляются до конечного пользователя.

В следующих трёх разделах рассматриваются вопросы безопасности системы.

Сохранность текстовых баз

Система не реплицирует текстовые коллекции. При установке локальной версии у заказчика вся его текстовая база хранится на его сервере и никогда не реплицируется на другие машины в сети. Все проверки по данной коллекции обрабатывают сервера заказчика, что обеспечивает сохранность текстовой базы.

Систему можно настроить таким образом, чтобы она не предоставляла вовне найденные источники заимствования целиком. В этом режиме производится процедура «сокращения источника», т. е. из него оставляются только те фрагменты, по которым найдено совпадение, либо можно запретить выдачу источников совсем. Это позволяет защитить коллекцию документов от распространения.

Безопасность протоколов

Взаимодействие систем `www.antiplagiat.ru` и «Антиплагиат.РГБ» осуществляется по шифрованному каналу с защитой по протоколу SSL. Авторизация системы проводится по специально подготовленным идентификационным ключам. Это гарантирует, что только один экземпляр системы может функционировать, как «Электронная библиотека РГБ» и никакая внешняя система не может получить несанкционированный доступ к пересылаемым данным.

Доступ к проверке по базе диссертаций и авторефератов имеют только те пользователи, которым администраторы системы явным образом открыли доступ к такой проверке. В настоящий момент поддерживается ограниченное предоставление доступа к проверке, причём ограничение может задаваться по числу проверяемых документов, по их суммарной длине и по времени использования доступа.

Подлинность отчётов

У каждого отчёта имеется несколько цифровых подписей. Необходимость нескольких подписей вызвана распределенностью системы и тем, что один отчет стремится сразу несколькими коллекциями, находящимися на разных серверах у разных подписчиков в сети.

Каждая коллекция имеет свои ключи и подписывает результаты своей работы — фрагмент отчёта, в дальнейшем называемый ревизией. Ревизия включает в себя контрольную сумму текста, вычисленную по алгоритму MD5 вместе со списком найденных источников и блоков цитирования. В ревизии также могут содержаться сокращённые тексты самих источников (если включенно сокращение источников), а также атрибуты, как отдельных источников, так и коллекции в целом. Наличие в ревизии контрольной суммы проверяемого документа гарантирует, что ревизия строилась именно для проверяемого документа, а не для какого-то другого текста (что исключает подмену текста проверяемого документа на другой — например, пустой — с целью получения отчёта о полной оригинально-

сти), а цифровая подпись самой ревизии гарантирует, что ревизия построена проверяющей коллекцией (исключается искажение самой ревизии).

После того, как все фрагменты отчёта построены, они через систему шлюзов отправляются к инициатору проверки. Например, если проверяемый документ находился в РГБ, то все фрагменты отправляются в РГБ, если с сайта `www.antiplagiat.ru`, то в хранилище данного сайта. Инициатор проверки собирает их в единый отчёт и подписывает его своим ключом, что гарантирует, что в отчёт включены все необходимые ревизии. Помимо этого, подпись отчёта позволяет однозначно определить создателя данного отчёта — при его просмотре посредством программы Antiplagiat ReportViewer создатель отображается в нижней части экрана.

Таким образом, подделки отчётов полностью исключены.

Редактирование и просмотр отчётов

Несмотря на то, что система автоматически отфильтровывает незначащие заимствования, внушительная часть из них остается в отчётах, так как в целом ряде случаев степень значимости заимствования не может быть определена системой. Если система не может точно определить, что фрагмент незначим, то он остаётся в отчёте и уже пользователь должен принять это решение. Для упрощения работы по анализу текста пользователю предоставлена возможность самостоятельно обозначать любые найденные заимствования как «незначимые» (при этом, указания на такие заимствования удаляются из отчета), а также сохранять изменённые отчёты прямо в своей коллекции. Для защиты от злоупотребления удалением найденных блоков, при применении данной функции в отчёте появляется предупреждение, что некоторые блоки были удалены, а также возможность вернуть все блоки обратно. Дополнительно предусмотрена возможность экспортировать отчёты, в том числе и с удалёнными блоками, в виде отдельных файлов и просматривать их с помощью отдельного приложения, не требующего подключения к сети — AntiPlagiat ReportViewer.

Хранение документов и атрибутов

Коллекция хранит все данные в виде архивов — больших бинарных файлов, внутри которых подряд сохранены отдельные документы коллекции. По сравнению с хранением текстов в отдельных файлах, данный подход существенно экономит дисковое пространство за счёт отсутствия неиспользуемой ёмкости в конце кластеров файловой системы диска, а также существенно ускоряет поиск нужного текста. Для дополнительной экономии места поддерживается сжатие текстов различными архиваторами: в настоящий момент используются алгоритмы deflate (также применяется в архиваторе ZIP) и BWT (применяется в архиваторе BZ2). Для хранения данных определённого типа заводится свой архив, на данный момент их шесть:

— архив текстов документов: обязателен; хранит тексты документов;
— архив нормализованных текстов: необязателен; в нём сохраняются видоизменённые тексты документов, подготовленные к поиску цитирования (все слова нормализованы, что и дало название данному архиву, — т. е. приведены к начальной словоформе: буквы «ё» заменены на «е» и т. п.); может быть перестроен по архиву текстов; в случае его отключения нормализация текстов выполняется по мере необходимости, что замедляет процесс проверки документов;
— архив документов: необязателен; хранит исходные двоичные файлы документов (например `*.doc`; `*.pdf`); нужен только в случае, если пользователь захочет получить исходный двоичный файл документа; для поиска цитирования не используется;
— архив ревизий: обязателен; хранит построенные фрагменты отчётов;
— архив атрибутов документов: обязателен; хранит атрибуты каждого документа вместе с историей их изменения — имеется возможность проследить историю правок пользователями атрибутов указанного документа;
— архив кэширования: необязателен; хранит дополнительные двоичные данные для поискового ядра по часто используемым источникам; в случае его отключения ядро перестраивает эти данные при каждом обращении к источнику, что увеличивает время поиска.

Все архивы могут размещаться на отдельных физических дисках, что позволяет оптимизировать дисковый ввод/вывод и достигать оптимальной производительности дисковой подсистемы сервера.

Индексы

Индексы — это структуры данных, позволяющие существенно ускорить поиск за счёт организации системы навигации по текстам и отсутствия необходимости перебора всей коллекции текстов для проверки факта наличия заданного фрагмента.

У коллекции есть два индекса, выполняющие одну и ту же задачу, но обладающие разными характеристиками:

— постоянный индекс: оптимизирован для хранения больших объёмов данных, обеспечивает быстрый поиск при любых объёмах коллекции, нечувствителен к её размеру; относительно компактен, занимает мало места на диске; добавление новых записей требует существенных

временных затрат: приходится полностью пересматривать весь индекс;

— временный индекс: позволяет быстро добавлять новые документы, но с ростом объёма время поиска увеличивается; предназначен для временной индексации документов, пока они не занесены в постоянный индекс.

Оба индекса поддерживают усечение, позволяющее обменивать качество проверки на снижение времени поиска и объёма индексов. Усечение индекса сделано таким образом, что существенное снижение его объёма приводит к несущественному снижению качества поиска. В частности, при принудительном усечении индекса в 4 раза средняя оценка оригинальности по тестовому корпусу, сформированному из загруженных пользователями документов выросла всего на 1% и составила 63%. При усечении индекса более, чем в 8 раз, качество начинает существенно снижаться. При усечении в 64 раза средняя оценка того же корпуса выросла на 14% и составила 76%. При применении неусеченного индекса оценка составила 62% оригинальности.

Потеря качества проявляется, в основном, на заимствованиях небольшой длины, поэтому если нужно отлавливать копирование только больших блоков (например, сразу по несколько страниц), можно использовать усечение вплоть до 64 раз, качество будет оставаться приемлемым. При усечении индекса в N раз время поиска по данному индексу также снижается в N раз.

Все индексы позволяют дополнительно держать в оперативной памяти небольшой объём данных, ускоряющий обработку документов с большим процентом оригинальности. Данная надстройка работает по принципу hash-таблицы и осуществляет быстрый отсев фрагментов текста, заведомо отсутствующих в индексах на диске. Соответственно, отсеянные фрагменты искать на диске бесполезно, что позволяет экономить на обращениях к внешней памяти.

Существует возможность отключения индексов у коллекции. Отключение временного индекса позволяет очень быстро добавлять много документов в индекс, но поиск по ним начнётся только после перестройки постоянного индекса. Отключение обоих индексов делает невозможным поиск цитирования по данной коллекции, но является целесообразным, если коллекция используется исключительно как хранилище документов: позволяет сэкономить немного памяти.

Литература

[1] Публичный сайт системы «Антиплагиат». `http://www.antiplagiat.ru`.

[2] Сайт системы «Антиплагиат» для ВУЗов. `http://corp.antiplagiat.ru`.

[3] Сайт системы «Антиплагиат» в РГБ. `http://antiplagiat.rsl.ru`.

[4] Сайт Электронной библиотеки диссертаций РГБ. `http://diss.rsl.ru/`.

[5] *Журавлёв Ю. И., Рудаков К. В., Чехович Ю. В. и др.* Система распознавания интеллектуальных заимствований «Антиплагиат» // Доклады 12-й всероссийской конференции «Математические методы распознавания образов» (ММРО-12). Москва, 2005. С. 329–332.

[6] *Журавлёв Ю. И., Рудаков К. В., Чехович Ю. В. и др.* О проекте «Антиплагиат» // Доклады международной конференции «Интеллектуализация обработки информации», Симферополь, 2006. — С. 92–94.

Математическая модель управления процессом обучения в ИОС

Галеев И. Х.
monap@kstu.ru
Казань, Казанский государственный технологический университет

В статье рассматривается математическая модель управления процессом обучения, реализованная в инструментальных средствах проектирования интеллектуальных обучающих систем (ИОС) серии МОНАП. Создание ИОС связано с подходом к процессу обучения, как к процессу управления, в котором обучаемый является объектом управления, а ИОС — источником управления. Процесс обучения осуществляется как управляемый, адаптивный и контролируемый процесс решения учебных задач. Адаптивный процесс управления обучением реализуется как процесс принятия решений, в котором выбор пути продолжения обучения существенно зависит от предыстории обучения. Причем выбор одного из путей продолжения обучения не определяется до конца обучающей программы, задается лишь направление движения на очередной шаг. На следующем шаге процесс принятия решения повторяется с учетом новой информации. Для идентификации (оценки) навыков/умений обучаемого используется Байесовский подход. Адаптивное управление процессом обучения основано на стабилизации субъективной трудности учебных задач.

Mathematical control model of training process in ITS

Galeev I. Kh.
Kazan, Kazan State Technical University

This article reviews mathematical control model of training process, realized in instrumental projective tools for intellectual training systems (ITS) of MONAP series. Choice of path for continuing training not determined until end of training program, only direction of movement for next step is defined. On next step, decision process is repeated with new information. For identifying (rating) skills/abilities of student Bayes' method is used.

Актуальность

В рабочей программе Евросоюза FP7 на 2009–2010 гг. по информационным и коммуникационным технологиям `http://cordis.europa.eu/fp7/ict/` указывается, что адаптивные обучающие системы — это инновационные решения, базирующиеся на технологиях искусственного интеллекта, и способные самонастраивать свою работу оптимальным образом, поддерживать и реагировать на действия обучаемых и учителей, используя информацию об их поведении.

Еврокомиссия ожидает, что будут получены научные результаты, нацеленные на разработку общей концептуальной модели, демонстраторов и хорошую практическую реализацию. Кроме того, в научных результатах ожидается: инновационные подходы использования методов искусственного интеллекта в сочетании с такими технологиями как моделирование (simulation), изложение материала (story telling), обучение в сотрудничестве (collaborative learning).

К ожидаемым результатам также относятся новые архитектуры интеллектуальных обучающих систем и когнитивная диагностика.

Введение

Развитие и совершенствование архитектуры интеллектуальных обучающих систем (ИОС) находится в центре внимания многих исследователей [1]. Одним из основных направлений проводимых работ является решение проблемы адаптивного управления процессом обучения. В случаях, когда в алгоритмах управления используются дидактические принципы обучения, инвариантные к предметной области (ПО) обучения, могут быть разработаны инструментальные средства проектирования ИОС. Педагог, использующий такие средства в конкретной ПО должен обеспечить параметрическую настройку этих принципов к ПО и конкретным обучаемым для обеспечения адекватности управления обучением в проектируемой ИОС.

В результате анализа ряда теорий обучения выделен следующий ряд принципов организации обучения, инвариантных к ПО обучения.

Процесс обучения рассматривается как управляемый и контролируемый процесс решения учебных задач. Определение свойств учебных задач и выдача подкреплений должны осуществляться на основе идентификации умений обучаемого на каждом шаге обучения. В процессе обучения должен соблюдаться принцип перехода от решения простых учебных задач к сложным. Переход к усвоению нового учебного материала осуществляется в случае успешного усвоения предыдущего материала. В процессе обучения должна осуществляться стабилизация субъективной степени трудности учебных задач для каждого обучаемого.

Основные понятия

Формализация выделенных принципов осуществляется следующим образом.

Экспертом-педагогом разрабатывается алгоритмическое предписание, описывающее пути решения учебных задач в заданной ПО обучения.

Разработка алгоритмического предписания является, в общем случае, слабоформализуемой, многокритериальной задачей. В результате анализа предметной области обучения выбираются базовые (первичные) элементы, представляющие собой простые понятия (концепты), на основе которых строится рассматриваемый учебный материал. При этом некоторые понятия, являясь базовыми для одной предметной области, в другой могут оказаться сложными, производными понятиями. С учетом выбранных базовых элементов и на основе структурно-алгоритмического анализа деятельности по решению задач определенного класса осуществляется выделение типовых операций, составляющих содержание рассматриваемой деятельности. Под типовой операцией понимается законченная по смыслу, учитывающая специфику предметной области обучения операция, предполагающая элементарные действия над первичными элементами (концептами). Обучение учащихся алгоритмам решения определенных задач осуществляется через управляемое и контролируемое выполнение учебных задач. Например, в ИОС грамматике немецкого языка, спроектированной с помощью инструментальных средств серии MONAP, концептами являются: артикль, род, число, падеж и т. д., а одна из операций, описывающих склонение прилагательных, представлена в виде правила: «ЕСЛИ перед прилагательным и существительным стоит определенный артикль der или одно из местоимений dieser, jener, solcher, jeder, welcher и определяемое существительное мужского рода, ТО окончанием прилагательного является –е» [2, 3]. На рис. 1 представлено формирование набора операций (правил) при проектировании ИОС грамматике русского языка.

Множество типов операций, выполняемых обучаемым при решении задач заданной ПО обучения и соответствующих алгоритмическому предписанию, обозначается через $Y = [y_1, \ldots, y_J]$.

В качестве основного компонента оверлейной модели навыков/умений обучаемого, используется вектор:

$$P(k) = [P_1(k), \ldots, P_J(k)],$$

где $P_j(k)$ — вероятность правильного применения операции y_j на k-м шаге обучения ($j = 1, \ldots, J$).

Сложность задачи, выданной на k-м шаге обучения, описывается вектором $L(k)$:

$$L(k) = [L_1(k), \ldots, L_J(k)],$$

где $L_j(k)$ — число операций y_j, использование которых необходимо при выполнении задачи ($j = = 1, \ldots, J$).

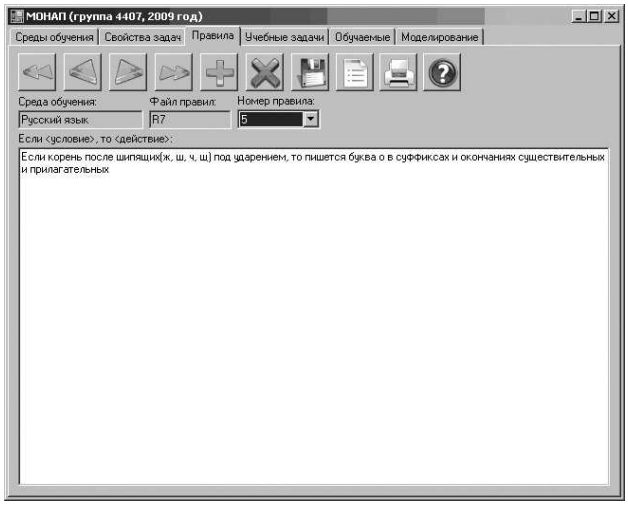


Рис. 1. формирование набора операций (правил) при проектировании ИОС грамматике русского языка.

Мера трудности задачи $T(k)$ вводится как средняя доля ошибок, ожидаемых при выполнении задачи, т. е.:

$$T(k) = \frac{\mathrm{MAT}(k)}{S(k)},$$

где $\mathrm{MAT}(k)$ — математическое ожидание числа ошибок при выполнении задачи:

$$\mathrm{MAT}(k) = \sum_{j=1}^{J} [1 - P_j(k)] \times L_j(k) = \sum_{j=1}^{J} q_j(k) \times L_j(k),$$

где $q_j(k)$ — вероятность неправильного применения операции y_j на k-м шаге обучения.

В соответствии с ассоциативно-рефлекторной теорией усвоения необходимо стремиться к тому, чтобы на каждом шаге обучения выполнялось неравенство (стабилизация субъективной степени трудности):

$$|T_{\text{опт}} - T(k)| \leqslant \Delta T,$$

где $T_{\text{опт}}$ — оптимальная мера трудности (обычно $T_{\text{опт}} = 0{,}5$, т. е. задача должна быть средней, посильной для обучаемого, трудности); ΔT — размер интервала.

Целью обучения является достижение заданного уровня обученности в каждом классе задач ПО обучения при одновременной минимизации времени обучения t (экстремальная цель), где уровень обученности определяется следующим образом: оценка вероятности правильного применения операции y_j при выполнении задачи требуемой сложности должна удовлетворять неравенству:

$$P_j(k) \geqslant P_{j\text{кон}}.$$

Если достигнут заданный уровень обученности, то обучение заканчивается.

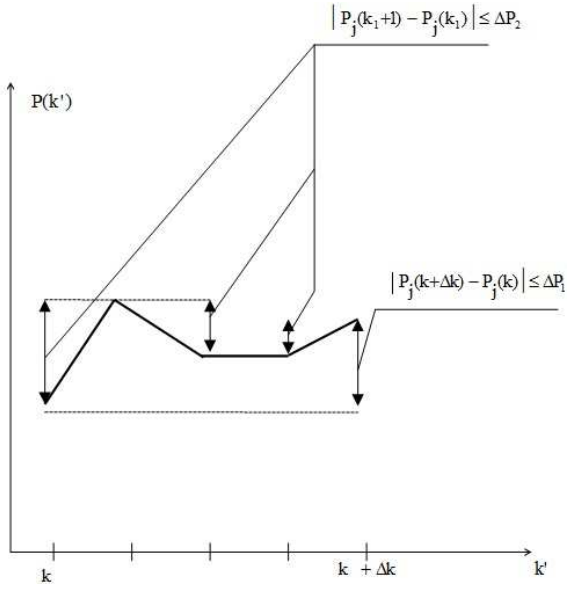


Рис. 2. Аварийное окончание.

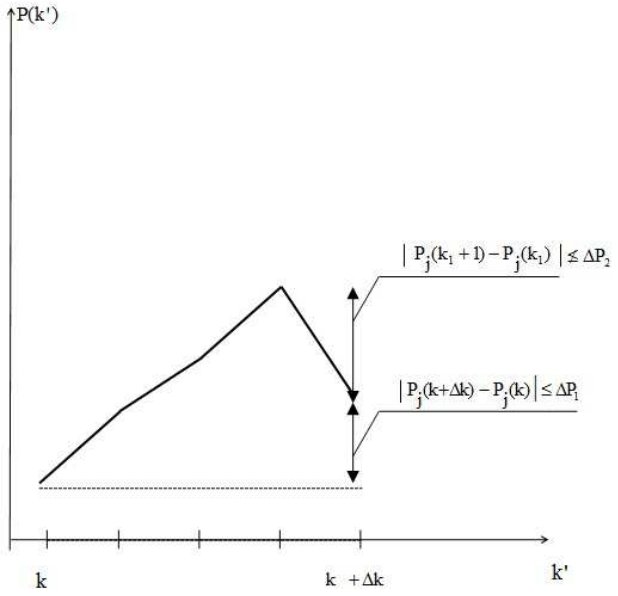


Рис. 3. Продолжение обучения.

Если хотя бы в одном классе задач ПО обучения имеет место одно или оба из неравенств в следующей системе:

$$\begin{cases} P_j(k) < P_{j\text{кон}}; \\ S(k) < S_{\text{кон}}, \end{cases}$$

то обучение продолжается.

На каждом шаге обучения, начиная с $(k+\Delta k)$-го, производится проверка на аварийное окончание. Аварийное окончание обучения осуществляется, если хотя бы для одной операции имеет место система неравенств:

$$\begin{cases} |P_j(k+\Delta k) - P_i(k)| < \Delta P_1; \\ |P_j(k+1) - P_i(k_1)| < \Delta P_2, \end{cases}$$

где Δk — предаварийное (критическое) число шагов обучения, во время которых характеристики обучаемого могут не улучшаться; ΔP_1 задает первый интервал изменения значений элементов вектора $P(k)$; k_1 изменяется от k до $(k + \Delta k - 1)$, то есть второе неравенство системы в свою очередь задает систему неравенств; ΔP_2 задает второй интервал изменения значений элементов вектора $P(k)$. Условия аварийного окончания иллюстрируются на (рис. 2, где $k^1 = 1, \dots, k, \dots$).

Необходимость использования системы неравенств для описания аварийного окончания вызвана тем, что моделью обучения предусматриваются ситуации, когда $P_j(k_1 + 1) < P_j(k_1)$, вызванные, например, забыванием (была значительная пауза в обучении), слабой мотивацией, усталостью и другими «стрессовыми» ситуациями. Эти ситуации не должны вести к аварийному окончанию. Причиной аварийного окончания является либо слабая подготовка, либо неэффективность обучающих воздействий (комментариев к ошибкам), либо и то, и другое. Нарушение второго неравенства системы предотвращает аварийное окончание обучения в случае, когда уровень знания обучаемого увеличивался, но произошел неожиданный спад, величина которого больше значения ΔP_2 («порога стресса»), и выполнилось первое неравенство системы, являющееся необходимым условием аварийного окончания (рис. 3, где $k^1 = 1, \dots, k, \dots$)

Идентификация (оценка) навыков / умений обучаемого

В предлагаемой модели обучения определение $P_j(k)$ осуществляется следующим образом. Для каждой операции y_j вводится N гипотез H_i $(i = 1, \dots, N)$, соответствующих N состояниям обученности. Каждому i-му состоянию обученности соответствует условная вероятность $\mathsf{P}(A_j \mid H_i)$ правильного применения операции y_j в каждом из L_j ее применений, равная $\frac{i}{N+1}$. Гипотезы H_i образуют полную группу несовместных событий, т. е. имеет место:

$$\sum_{i=1}^{N} P_{ij} = 1,$$

где P_{ij} — вероятность гипотезы H_i для операции y_i.

Число состояний обученности зависит от необходимой точности определения состояния обученности. Значение N задается экспертом-педагогом и используется, кроме того, для определения значения $P_{j\text{кон}}$ равного $\frac{N}{N+1}$.

На каждом шаге обучения наблюдается событие $B_j(k)$, состоящее в правильном применении j-й операции $M_j(k)$ раз из $L_j(k)$ заданных. Эта информация служит для перерасчета распределения вероятностей гипотез P_{ij} с помощью формулы Бейеса.

Каждый k-й шаг обучения характеризуется априорным и апостериорным распределениями вероятностей гипотез о состояниях обученности $P^0_{ij}(k)$ и $P^1_{ij}(k)$, связанных между собой следующей зависимостью:

$$P^1_{ij}(k) = \frac{P^0_{ij}(k) \times \mathsf{P}\big(B_j(k) \,|\, H_i\big)}{\sum_{s=1}^{N} P^0_{sj}(k) \times \mathsf{P}\big(B_j(k) \,|\, H_s\big)}, \qquad (1)$$

где $\mathsf{P}\big(B_j(k) \,|\, H_i\big)$ — определяется по теореме Бернулли, т. е.

$$\mathsf{P}\big(B_j(k) \,|\, H_i\big) = C^{M_j(k)}_{L_j(k)} \times \mathsf{P}\left(A_j \,|\, H_i\right)^{M_j(k)} \times \\ \times \left(1 - \mathsf{P}\left(A_j \,|\, H_i\right)\right)^{L_j(k) - M_j(k)},$$

где $C^{M_j(k)}_{L_j(k)}$ — число сочетаний из $L_j(k)$ по $M_j(k)$.

Учитывая, что априорное распределение вероятностей гипотез на k-м шаге совпадает с апостериорным распределением на $(k-1)$-м шаге, т. е. имеет место:

$$P^0_{ij}(k) = P^1_{ij}(k-1),$$

формулу (1) можно переписать в виде, который подчеркивает ее рекурсивный характер (учитывается вся история обучения), а именно:

$$P^1_{ij}(k) = \frac{P^1_{ij}(k-1) \times \mathsf{P}\big(B_j(k) \,|\, H_i\big)}{\sum_{s=1}^{N} P^1_{sj}(k-1) \times \mathsf{P}\big(B_j(k) \,|\, H_s\big)}.$$

Вероятность правильного применения операции y_j на k-м шаге определяется по формуле полной вероятности:

$$\mathsf{P}\big(A_j(k)\big) = \sum_{i=1}^{N} P^1_{ij}(k) \times \mathsf{P}\left(A_j \,|\, H_i\right).$$

Окончательная оценка $P_j(k)$ получается приведением значения, вычисленного по формуле, до введенных состояний обученности.

Осуществление на k-м шаге обучения контроля ошибок и выдачи необходимых объяснений позволяет вести прогнозирование вероятности правильного применения операции y_j на $(k+1)$-й шаг обучения:

$$P_j\left(k+1 \,|\, k\right) = V \times P_j(k),$$

где V определяется следующим образом:

$$V = \frac{P_j(k)}{P_j(k-1)}.$$

Прогнозирование вводится после первых двух шагов обучения.

Выводы

Для построения рассмотренной модели введены и формализованы следующие основные понятия: модель обучаемого, сложность учебной задачи, трудность учебной задачи, цель обучения, предаварийное число шагов обучения, «порог стресса», состояние обученности, коэффициент прогнозирования обученности. В модели обучения предусмотрена возможность аварийного окончания обучения в случае, когда процесс обучения не является эффективным, что оптимизирует затраты на его проведение.

Практическая ценность указанной модели заключается в обеспечении возможности разработки на ее основе инструментальных средств проектирования ИОС некоторому виду формируемой деятельности (навыкам алгоритмической природы) [2, 3]. Указанные инструментальные средства использовались при проектировании ИОС грамматикам естественных языков (немецкого и русского). Планируется проектирование ИОС грамматикам формальных языков, в частности SQL. Использование бейесовского подхода при идентификации (оценке) навыков/умений обучаемого и осуществление прогнозирования состояния обученности обеспечивают учет предыстории обучения, что является основой для организации адаптивного обучения.

Литература

[1] *Nkambou R.* Intelligent Tutoring Systems (Guest Editorial) // Educational technology & Society. — 2010. — Vol. 13, No. 1. — Pp. 1–2.

[2] *Galeev I.* Adaptive Training: Direct and Return Routes (From Knowledge to Skills and Back) // Proceedings of the 31-st International Convention MIPRO (MIPRO-2008) Conference Computers in Education, Opatija, Croatia, 26–30 May 2008. — Pp. 159–163.

[3] *Galeev I.* Evaluation of ITS effectiveness // Proceedings of the International Conference on Information Technologies (InfoTech-2008), Bulgaria, 19–20 September 2008, — Vol. 1. — Pp. 133–138.

Применение латентно-семантического анализа к исследованию политических блогов*

Корнилина Е. Д., Петров А. П.
ekornilina@gmail.com
Москва, ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

В работе предлагается подход к исследованию политических блогов, основанный на применении латентно-семантического анализа.

Research of political blogs by means of LSA*

Kornilina E. D., Petrov A. P.
KIAM RAS, Moscow, Russia

A new aproach to political blogs and party programs research is suggested. The approach is based on Latent Semantic Analysis.

Введение

Политически активные люди стремятся донести свои убеждения до как можно большего количества человек. Одним из наиболее простых способов достигать этого на регулярной основе является создание специализированного сообщества в сети Интернет, в котором участники смогут общаться без чёткого разграничения позиций. Такими сообществами являются социальные сети. Web-сайты, на которых находятся личные записи авторов, называются блогами, и как раз политические блоги нередко относят к новому средству массовой информации в силу их постоянной обновляемости и общедоступности. В США широкое распространение получили так называемые netroots — политически активные сетевые сообщества (чаще всего ассоциируемые с левоцентристскими движениями), взаимодействующие через блоги и другие Интернет-СМИ, в т. ч. wiki-ресурсы и социальные сети. Как отмечает профессор юридической школы Гарварда Й. Бенклер [1], именно на такие сообщества возлагается надежда по расширению возможностей отстаивания народных интересов, т. к. на практике наиболее влиятельные в данной сфере иные средства массовой информации либо контролируются государством, либо являются коммерческими и сильно зависят от рекламы.

Сейчас даже серьёзные Интернет-издания побуждают своих читателей высказываться, публикуя их на ряду с профессиональными журналистами. Более того, некоторые люди приобретают авторитет именно благодаря записям в блогах и нередко могут переквалифицироваться уже в профессиональных экспертов.

Построение модели подобных сообществ помогает понять их структуру, производить кластеризацию и выявлять отличительные особенности. Для этого предлагается использовать латентно-семантический анализ (ЛСА), также применяющийся в исследовании литературных произведений, предмет изучения которого составляют исключительно сами тексты [2, 3].

Исходные данные и предварительная обработка

Как отмечалось выше, политические блоги, с точки зрения организации, являются социальными сетями, для анализа которых обыкновенно используются теоретико-графовые методы, опирающиеся, в первую очередь, на взаимоотношения между участниками. В настоящем исследовании основным предметом изучения были сами тексты записей. Выбранный для этих целей латентно-семантический анализ является широко известным методом, применяемым в задачах поиска и классификации информации, т. к. он позволяет находить смысловые связи для отдельных слов и целых документов.

Уже давно пользователю при поиске в сети Интернет вместе с основным результатом предлагаются списки связанных запросов, созданные на основе, в том числе, результатов ЛСА [4, 5]. Программные реализации по обработке текстов на иностранных языках (например, реализации ЛСА [6, 7]; кластеризация контекстов [8]) в данном случае не применимы в чистом виде, т. к. не учитывают особенностей русского языка (например, морфологию).

Для русскоязычных текстов примеров решения подобных задач существенно меньше, отметим некоторые из них. Semanticanalyzer [9] позволяет делать морфологический анализ и выделяет семантические облака документов (наборы смысловых слов). Автоматическая классификация лексики [10] представляет собой синтез ЛСА с алгоритмами кластеризации и предназначен для автоматической кластеризации слов. Варианты ЛСА — вероятностный, инкрементальный и иерархический,

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 10-01-00332а.

применяются для автоматического прогнозирования пользовательских интересов исходя из накопленной информации о вкусах и интересах пользователей [11, 12]. Также различные разработки по кластеризации слов, выделению смысловой части текста и т. д. совместно с российскими коллегами ведёт словацкий Social Network Research Center [13].

Особенность настоящего исследования заключается, во-первых, в области применения (тексты политических блогов на русском языке), а, во-вторых, в поставленных для этой области задачах: соотнесение авторов с точки зрения семантики их сообщений, выявление структурных особенностей текстов.

Основная цель заключается в разработке подхода, позволяющего выявлять взаимные связи на основании предлагаемой текстовой информации, как между группами авторов, так и между частями текста для отдельных авторов в политической интернет-сфере. Преследуется цель кластеризации объектов, выявление авторской стилистики, скрытого смысла сообщений (в перспективе).

В качестве объекта исследований выступали русскоязычные тексты, представленные в популярных политических блогах (эксперимент 1), а также предвыборные программы партий (эксперимент 2).

Каждое встречаемое слово было приведено к начальной, с точки зрения морфологии, форме (первая по частоте, согласно [14]). Зарубежные коллеги не рекомендуют таких преобразований, однако ввиду разнообразия русскоязычных словоформ эта рекомендация не соблюдалась.

Следующим шагом было исключение стоп-слов (слов, не несущих самостоятельной смысловой нагрузки). С помощью выделенных по тематике текстов из национального корпуса русского языка [15] был построен список из 175 слов. Использование стандартных списков (как, например, 350 слов [16]) приводило к зашумлённым результатам.

Метод решения

В качестве инструмента исследований использовался латентно-семантический анализ, предлагающий оценку взаимосвязи между коллекцией документов и словами, которые в них встречаются. Анализируемый текст (представляющий собой, в общем случае, неразмеченную совокупность текстов различных авторов) разбивается на небольшие (50–100 слов) фрагменты, количество которых зависит от длины текста, при этом размер каждого из них (число слов) остаётся постоянным внутри одного исследования.

Затем строится матрица, характеризующая число вхождения встречаемых слов в каждый фрагмент. Использование слов, встречающихся в тексте по одному разу, вносит шумовые эффекты, поэтому такие слова исключаются. Перед дальнейшими преобразованиями элемент матрицы нормируется энтропией:

$$a_{ij} = g_i \log(\mathrm{tf}_{ij} + 1),$$

где tf_{ij} — число вхождений слова i во фрагмент j (term frequency), $g_i = 1 + \sum_j \frac{p_{ij} \log p_{ij}}{\log n}$, $p_{ij} = \frac{\mathrm{tf}_{ij}}{\mathrm{gf}_i}$, gf_i — общее количество появления слова i во всём тексте (general frequency).

Полученная матрица разлагается по сингулярным векторам (векторам, соответствующим сингулярным числам) [17]. Метод основывается на том факте, что подматрица, соответствующая первым k наибольшим сингулярным числам, является наилучшим приближением исходной матрицы в k-мерном подпространстве.

Таким образом, от матрицы большой размерности с помощью базиса выбранной длины осуществляется переход к матрице меньшей размерности, отражающей основную структуру исходной.

В полученной матрице выделялось два вида зависимостей: слово–слово, фрагмент–фрагмент. Каждому слову и каждому фрагменту соответствует разложение в базисе сингулярных векторов, взаимосвязь между ними вычислялась как абсолютное значение коэффициента корреляции. Результаты представляются в графическом (в градациях серого) формате — чем больше зависимость, тем темнее цвет. Получается окрашенная корреляционная матрица всевозможных попарных зависимостей, в которой можно анализировать, как и просто интенсивность окраски областей, так и их рисунок.

Эксперименты

Реализованный программный метод представляет результаты в виде матрицы, в которой i-й строке и i-му столбцу соответствует идущий по порядку i-й фрагмент (или терм, не являющийся стоп-словом) анализируемого набора текстов. Цвет элемента (i, j) матрицы соответствует абсолютному значению коэффициента корреляции между i-й строкой и j-м столбцом, он тем темнее, чем это значение, а значит, и зависимость между фрагментами текстов, больше (т. е. диагональные элементы имеют чёрный цвет).

В экспериментах первого типа производилось изучение нескольких популярных политических блогов. Один из результатов представлен на рис. 1. Строкам 1–48 соответствуют фрагменты записей автора, более склонного к эмоциональным высказываниям неформального характера, как видим, они заметно коррелируют друг с другом. Строкам 48–108 соответствуют фрагменты представителя правящей партии, они гораздо меньше коррелируют между собой, что указывает на разнообразие используемой им лексики.

Следует отметить, что строки 86–108 относятся к записям в публицистическом жанре, в них ав-

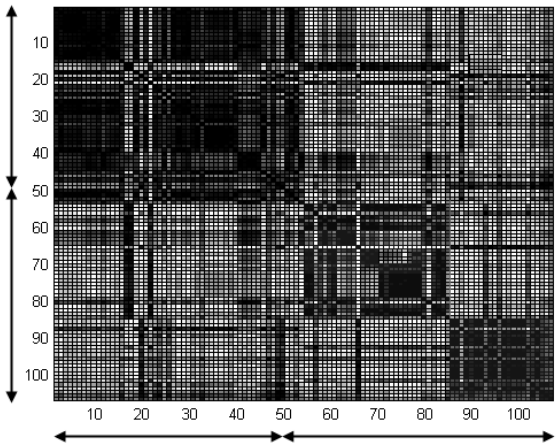


Рис. 1. Корреляционная матрица (размерность 15).

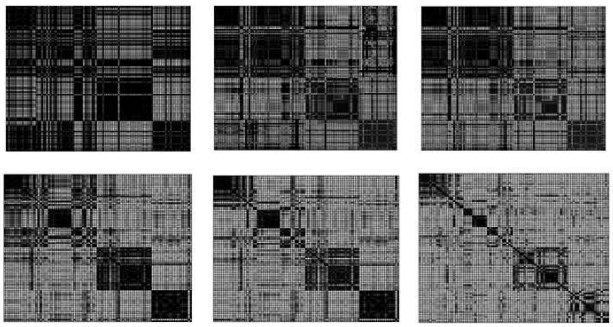


Рис. 2. Корреляционные матрицы для базисов различной размерности.

тор, видимо, был более ограничен в формах изъявления, в результате чего соответствующий квадрат получился густо окрашенным. На рис. 2 показаны результаты, получающиеся при изменении размерности сингулярного базиса обратной свёртки от 2 до 40. Полученные картинки подтверждают идею о том, что чем больше размер базиса, тем более тонкие связи будут отображены, и наоборот, чем он меньше, тем более «качественная» оценка будет представлена.

Способность ЛСА различать стилевые особенности автора подтверждается в экспериментах над записями в блогах политического сообщества, рис. 3. Строчки 1–37 соответствуют описаниям проводимых сообществом мероприятий, строчкам 40–55 соответствует серия сообщений об отношении к Украине и США. Отдельно выделившаяся, не коррелирующая ни с чем часть в строках 37–40 содержит тексты юридического характера, фрагменты судебных исков, представленные в блоге сообщества.

Аналогичные эксперименты показали, что из блогов научной, философской и религиозной направленности, метод отличает первый тип от второго и третьего, последние же дают схожий рисунок, при этом списки наиболее частотных слов для этих блогеров очень похожи (что можно трактовать как способность метода учитывать контекст употребления слов).

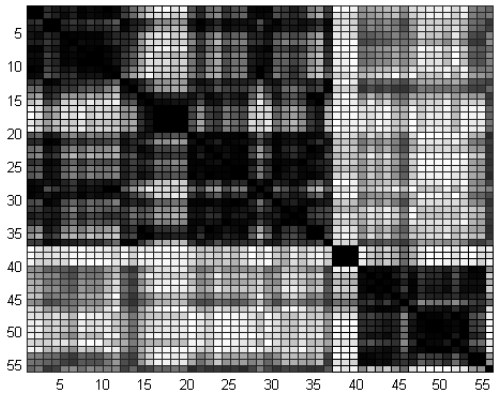


Рис. 3. Корреляционная матрица записей в блоге популярного политического сообщества.

Для некоторой апробации результатов было решено применить метод к выверенным (далёким от разговорного жанра) текстам, для которых известно официальное авторство (принадлежность к партии). Были проанализированы тексты официальных программ политических партий на выборах 2008 года в Государственную Думу — эксперименты второго типа. Ниже приводятся результаты по трём, наиболее различимым относительно используемого метода, партиям — «Единая Россия» (ЕР), Коммунистическая партия Российской Федерации (КПРФ) и «Яблоко».

Анализ текстов одной партии позволил выделить их наиболее определяющие, с точки зрения ЛСА, слова (термы). Например,

- для партии ЕР: «гражданский», «единый», «задача», «защита», «решение» и т. п.,
- для КПРФ: «культура», «народный», «природный», «сельский», «труд»,
- для «Яблока»: «жильё», «земля», «монополия», «приватизация», «собственность».

При этом можно отметить, что у партии ЕР употребление терма «Путин» сильно коррелирует с термами «проект», «программа», «решением» и «реализация», а у партии КПРФ терм «программа» связан с термами «наука», «поддержка», «природный».

Проводилось попарное сопоставление программ, при этом в некоторых случаях различие между партиями было более явным (например, КПРФ и «Яблоко», рис. 4; ЕР и «Яблоко», рис. 5), а в некоторых — менее явным (КПРФ и ЕР, рис. 6).

Также было обнаружено, что в программе «Яблока» вырисовываются две слабо коррелирующие между собой части (рис. 5, строки 56–82 и 82–112). Оказалось, что первая из них содержит первый и второй разделы партийной программы, вторая часть — все остальные.

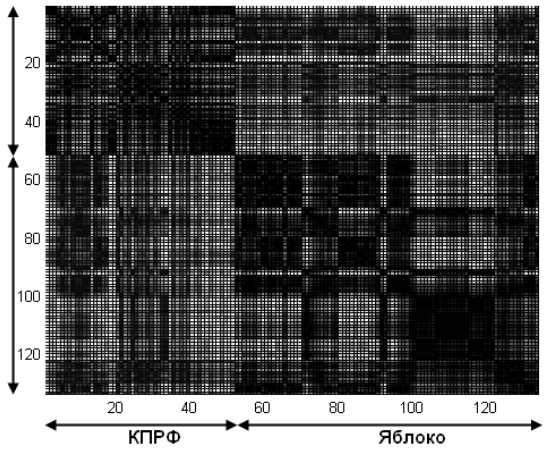


Рис. 4. КПРФ и Яблоко.

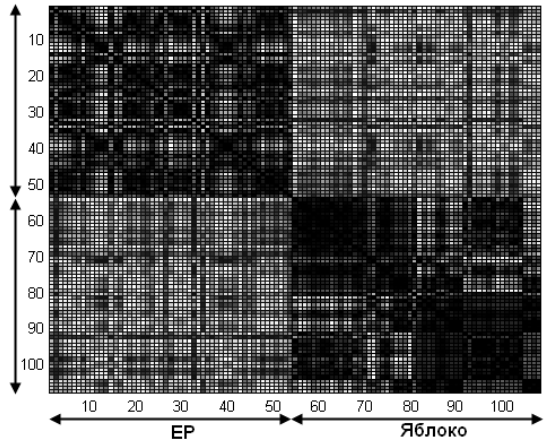


Рис. 5. ЕР и Яблоко.

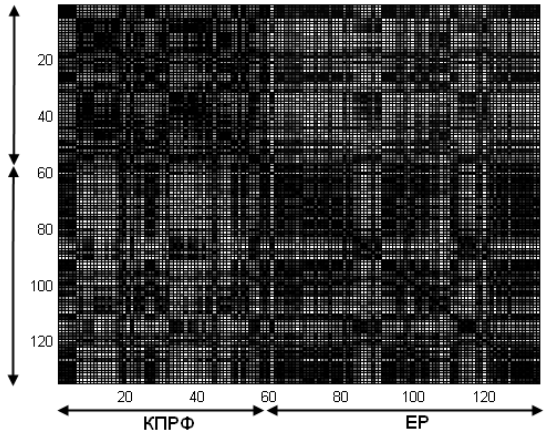


Рис. 6. КПРФ и ЕР.

Заметим, что этот составной характер программы «Яблока» трудно было бы предположить априорно, он был обнаружен лишь средствами латентно-семантического анализа. Это свидетельствует о наличии серьёзной перспективы для применения данного метода к задачам политического анализа.

Заключение

В работе предложен подход к анализу политических интернет-сообществ, с его помощью проведён ряд экспериментов. Подтверждено, что используемый в методе латентно-семантический анализ может выделять тексты различной стилистики.

Литература

[1] *Бенклер Й.* Полис размером с Америку // Русский Журнал/Штаты-2008 — 2008. № 1. — С. 90 — 91.

[2] *Nakov P.* Latent Semantic Analysis of Textual Data // In Proceedings of the International Conference on Computer Systems and Technologies (CompSysTech'00). — Sofia, Bulgaria. June 2000. — Pp. 5031–5035.

[3] *Landauer T., Foltz P., Laham D.* Introduction to Latent Semantic Analysis // Discourse Processes. — 1998. — No. 25, — Pp. 259–284.

[4] `http://www.seobook.com/archives/000657.shtml` — Google Semantically Related Words and Latent Semantic Indexing Technology.

[5] *Сегалович И.* Как работают поисковые системы // Мир Интернет. — 2002. — № 10.

[6] `http://lsa.colorado.edu` — LSA @ CU Boulder.

[7] `http://cran.at.r-project.org/web/packages/lsa/index.html` Fridolin Wild LSA.

[8] `http://www.d.umn.edu/~tpederse/senseclusters.html` Sense Clusters.

[9] `http://semanticanalyzer.info/blog/` — Semantic analyzer.

[10] *Mitrofanova O., Mukhin A., Panicheva P., Savitsky V.* Automatic word clustering in russian texts — Heidelberg: Springer Berlin, 2007. — С. 85–91.

[11] *Vinokourov A., Girolami M.* Probabilistic Framework for the Hierarchic Organisation and Classification of Document Collections // Information Processing and Management. — 2002.

[12] *Лексин В. А., Воронцов К. В.* Анализ клиентских сред: выявление скрытых профилей и оценивание сходства клиентов и ресурсов // ММРО-13. — М.: МАКС Пресс, 2007.— С. 488—491.

[13] `http://sonet.webnode.cz/` — Social Network Research Center.

[14] `http://company.yandex.ru/technology/mystem/` — Морфологический анализатор текста.

[15] `http://www.ruscorpora.ru/` — Национальный корпус русского языка. — 2010.

[16] `http://www.ewgenij.net/stop-words.html` — Шумовые слова.

[17] *Berry M.* Large scale singular value computations // International Journal of Supercomputer Applications. — 1992. — V. 6, No. 1. — P. 13 — 49.

Динамическое обучение распознаванию статистических таблиц*

Кудинов П. Ю., Полежаев В. А.
pkudinov@gmail.com
Москва, ВЦ имени А. А. Дородницына РАН

При создании единого хранилища социально-демографических и экономических данных возникает задача его постоянного пополнения разнородными по структуре и форматам таблицами, получаемыми из различных источников. Для полуавтоматического решения данной задачи предлагается использовать алгоритмы динамического обучения классификации. Описываются требования к алгоритмам классификации и приводится анализ некоторых алгоритмов, которые могут использоваться для обработки таблиц.

On-line learning in statistical table processing*

Kudinov P., Polezhaev V.
Dorodnicyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russian Federation

When creating unified repository of socio-demographic and economic data there arises a problem of its continuous replenishment by tables received from different sources and having heterogeneous structure and format. A semi-automated solution based on on-line learning is proposed in this paper. Requirements to on-line learning algorithms are described and some algorithms are reviewed and tested on real sets of tables.

Анализ социально-демографических и экономических статистических данных является неотъемлемой частью многих исследований в экономике, социологии, других гуманитарных областях. Большой проблемой на сегодняшний день является разрозненность данных, представленных как в Интернете, так и в официальных источниках. Не существует единого удобного, надёжного, свободно доступного источника таких данных. Имеющиеся источники представляют данные в виде таблиц различных и плохо совместимых структур и форматов. Отсутствуют строгие правила, по которым составляются эти таблицы. Зачастую данные неполны, неточны и противоречат друг другу.

Таким образом, актуальна задача создания системы, с помощью которой можно было бы собирать статистические данные из разных источников, накапливать их и анализировать. Одной из основных функций такой системы должна быть выдача данных по запросам пользователей, в естественной табличной форме, с указанием первоисточников. В отличие от традиционных поисковых систем, организация поиска по таблицам требует нетривиальной предварительной обработки данных. После того, как новая таблица найдена и представлена в виде совокупности ячеек, необходимо выполнить её семантический анализ — для каждой ячейки определить единственно правильный способ записи её значения в хранилище, то есть, фактически, определить смысл ячейки.

Основные этапы выделения статистических данных из таблиц произвольной структуры были описаны в [1]. В данной работе отдельные подзадачи семантического анализа таблиц ставятся как задачи динамического обучения классификации [2]. Предполагается, что семантический анализ выполняется в полуавтоматическом режиме: таблица сначала размечается автоматически, несколькими алгоритмами классификации. Затем эта разметка предъявляется оператору (эксперту, выступающему в роли «учителя»), который при необходимости исправляет ошибки. Факты исправлений пополняют обучающую выборку и происходит дообучение алгоритмов. По мере увеличения обучающей выборки оператор тратит всё меньше и меньше времени на исправления. Это радикальное снижение трудозатрат по сравнению с обычным, нединамическим, подходом к обучению, когда оператору приходится размечать все поступающие таблицы.

Важным требованием к процедуре динамического обучения является *корректность* — алгоритмы должны дообучаться так, чтобы результат их применения к ранее проверенным таблицам не изменялся. Отметим, что требование корректности не предъявляется к большинству известных методов динамического обучения, что накладывает существенные ограничения на выбор метода, вынуждает строить корректные модификации известных методов и исследовать их корректность.

Основные понятия и определения

Таблица состоит из совокупности *ячеек*. Каждая ячейка может иметь один из трёх типов: ячейка данных, ключ, или пустая (неинформативная). *Ячейка данных* содержит одно значение, как правило, числовое. Для каждой ячейки данных по таблице должен быть определён, во-первых, набор ключей, во-вторых, *единицы измерения*.

Ключ представляет собой текстовую строку, которая относится к множеству ячеек данных, и задаёт (возможно, лишь частично) смысл этих ячеек.

Работа выполнена при финансовой поддержке РГНФ, проект № 08-02-12104в, и РФФИ, проект № 10-07-00609.

Распределение численности занятых в экономике регионов Российской Федерации по возрастным группам в 2000 г. (в процентах)

	Всего	в том числе в возрасте, лет						Средний возраст, лет
		до 20	20-29	30-39	40-49	50-59	60-72	
Российская Федерация	**100**	**2,0**	**21,5**	**27,2**	**30,3**	**14,1**	**5,0**	**39,3**
Центральный федеральный округ	**100**	**1,6**	**20,0**	**26,6**	**30,1**	**15,7**	**6,1**	**40,1**
Белгородская область	100	1,8	19,8	28,4	30,5	12,6	6,9	39,9
Брянская область	100	1,9	22,8	27,7	30,7	12,3	4,6	38,8
Владимирская область	100	2,2	21,0	26,5	30,6	14,4	5,2	39,4
Воронежская								

Рис. 1. Пример исходной таблицы простой структуры.

Набор ключей задаёт смысл ячейки данных полностью, то есть позволяет однозначно определить способ записи значения ячейки в хранилище.

На Рис. 1 представлен пример исходной таблицы простой структуры с одним блоком ячеек данных (светло-серый) и двумя блоками ключей (тёмно-серые). Значение 19,8, находящееся на пересечении 5-й строки и 4-го столбца, имеет следующий набор ключей: показатель «распределение численности занятых в экономике регионов Российской Федерации»; возрастная группа «20–29 лет»; период «2000 год»; территория «Белгородская область». Единицей измерения является «процент».

Как видно из примера, каждый ключ характеризуется типом, таким как «показатель», «возрастная группа», «период», «территория», «отрасль», и т. д. Число типов относительно невелико, тогда как число различных ключей может быть на порядки больше. Для каждого типа ключей строится словарь возможных значений ключей. В процессе обучения системы могут создаваться новые ключи, типы ключей и единицы измерения.

Задачи обучения

Семантический анализ каждой ячейки таблицы сводится к решению следующих подзадач:

1) распознавание типа ячейки;
2) распознавание структуры таблицы (взаимного расположения блоков данных и ключей);
3) поиск местоположения ключей, относящихся к ячейке данных;
4) выделение единиц измерения ячейки данных;
5) выделение периода времени;
6) распознавание типа ключа, либо принятие решения о создании нового типа ключа;
7) поиск подходящего ключа в словаре, либо принятие решения о синонимии ключей, либо принятие решения о создании нового ключа.

Заметим, что каждая из этих задач в принципе могла бы решаться чисто программистскими эвристическими приёмами. Однако необходимость постоянной адаптации такой программы к новым таблицам рано или поздно привела бы к неуправляемому росту её сложности и невозможности дальнейшего развития. Рассмотрим некоторые постановки задач обучения классификации.

Распознавание типа ячейки. Число классов равно трём: данные, ключ, пусто. Объектами являются ячейки таблицы. Признаками являются: доля цифровых последовательностей символов; доля буквенных последовательностей; относительный номер строки и столбца; длина строки; длина текста первой ячейки в строке. Результат классификации показывается оператору в виде цветной раскраски таблицы, см. Рис. 1.

Распознавание структуры таблицы. Таблицы различаются по структуре и типу связей между ячейками. Учёт этих различий необходим для создания оптимизированных процедур обработки таблиц каждого из типов. Предлагается выделять следующие типы таблиц:

1) простая таблица или таблица со сложными шапками;
2) таблица с супер-строками или супер-столбцами;
3) таблица с нетривиальным расположением ключей, относящихся к ячейкам с данными;
4) таблица, построенная в результате конкатенации нескольких таблиц.

При анализе таблицы генерируются следующие признаки: число colspan в шапках; число rowspan в шапках; число супер-строк наличие сдвигов внутри ячеек; наличие ячеек-указателей на другие ячейки («в том числе», «из них», двоеточия в конце текста); количество связанных множеств ячеек с данными; количество связанных множеств ячеек с ключами.

Выделение периода времени и единиц измерения. Для каждого числа в таблице должны быть определены период времени, к которому данное значение относится, и единица измерения данного значения. Обычно период времени и единица измерения выражены в тексте одного из ключей и отделены каким-либо способом от основного текста, например точкой с запятой, скобками и т. п. Эта информация должна быть удалена из текста прежде, чем будет осуществлен поиск наиболее близкого ключа в словаре. Оператор системы имеет возможность выделять единицы измерения даты в текстах ключей и, тем самым, обучать систему их расположению. По полученным данным строится обучающая выборка, состоящая из двух классов — даты и единицы измерения, а в качестве признаков используются следующие: небуквенные символы-разделители слева и справа от выделения; количество слов; количество существительных; количество прилагательных; количество непрерывных последовательностей цифр; часть речи первого слова; число сокращений.

Алгоритмы динамического обучения

При динамическом обучении (on-line learning) объекты появляются по одному, причём каждый объект обрабатывается только один раз. Динамическое обучение состоит из последовательности чередующихся шагов классификации и дообучения. На стадии классификации очередного объекта алгоритму не известно значение целевого признака, однако непосредственно после классификации ему передаётся правильный ответ, который используется для модификации параметров алгоритма (дообучения). Алгоритмы классификации, используемые для решения наших задач, должны удовлетворять требованию корректности, то есть при последующих модификациях они не должны делать ошибок на ранее классифицированных объектах.

Для сравнения были выбраны три алгоритма: ближайших соседей, RISE [3] и ITI (Incremental Tree Inducer) [4, 5]. Выбор этих алгоритмов обусловлен тем, что они основаны на запоминании обучающей выборки, что позволяет обеспечить выполнение требования корректности.

Были проведены эксперименты на реальных данных для задачи распознавания типа ячейки. Обучающая выборка состояла из 20 разнообразных таблиц, в каждой из которых было около 100 ячеек. Каждый эксперимент состоял из серии запусков, перед каждым из которых происходило случайное перемешивание таблиц, а затем ячеек в них. В каждом запуске небольшая часть исходной выборки использовалась для начального обучения алгоритма. Остальные объекты подавались алгоритмам последовательно. После классификации очередного объекта алгоритму давался правильный ответ и происходило его дообучение. Затем проверялась классификация всех ранее классифицированных объектов, чтобы удостовериться, что требование корректности выполнено.

Алгоритм k ближайших соседей основан на полном запоминании всей выборки. Обучение алгоритма заключается в добавлении нового объекта в список известных. При классификации происходит поиск k ближайших объектов и выбирается доминирующий класс. В качестве меры близости использовалось евклидово расстояние без взвешивания признаков. Очевидным недостатком данного алгоритма является скорость его работы. Результат эксперимента для этого алгоритма представлен на Рис. 2. Данный алгоритм позволяет получить неплохое значение ошибки на новых объектах и не делает ошибок на старых объектах.

Алгоритм RISE строит правила из объектов обучающей выборки. Классификация заключается в поиске ближайшего правила и использовании его класса в качестве ответа с помощью функции расстояния между правилом R, заданным в виде

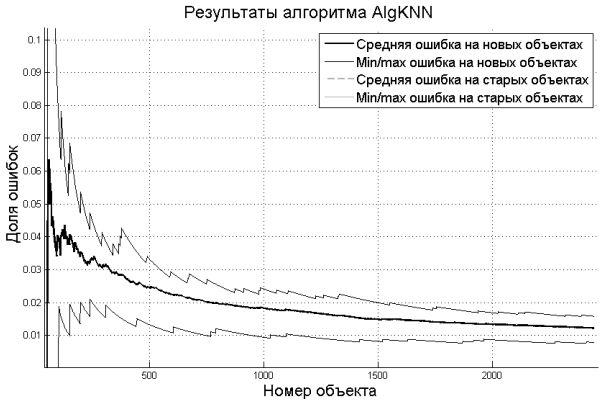


Рис. 2. Результат работы алгоритма KNN.

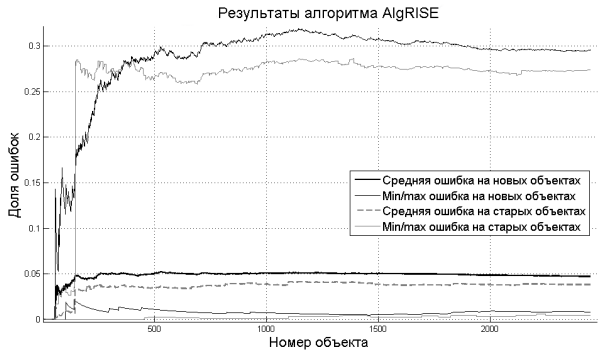


Рис. 3. Результат работы алгоритма RISE.

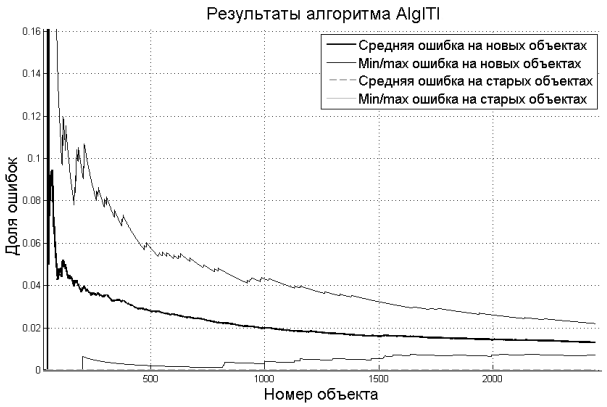


Рис. 4. Результат работы алгоритма ITI.

конъюнкции предикатов $r_1 \wedge \cdots \wedge r_N$, и объектом $E = (e_1, \ldots, e_N)$:

$$\Delta(R, E) = \sum_{i=1}^{N} \delta^2(i),$$

где $\delta(i)$ — функция расстояния по i-му признаку:

$$\delta(i) = \begin{cases} 0, & r_i = true; \\ \text{orddist}(i), & i\text{-й признак номинальный}; \\ \text{numdist}(i), & i\text{-й признак числовой}. \end{cases}$$

Предикатом для номинального признака является индикатор принадлежности некоторому подмноже-

ству допустимых значений S, а для числового — индикатор принадлежности отрезку $[a, b]$. Функция orddist(i) принимает значения 0 или 1 в зависимости от принадлежности множеству S, а функция numdist(i) равна расстоянию до отрезка $[a, b]$. Сначала из каждого объекта $e = (e_1, \ldots, e_N)$ обучающей выборки порождаются правило, состоящее из предикатов вида $r_i(x) = [x_i = e_i]$, если i-й признак номинальный и $r_i(x) = [x_i \in [e_i - \varepsilon, e_i + \varepsilon]]$, $\varepsilon > 0$, если i-й признак числовой. Далее правила обобщаются до ближайшего с точки зрения расстояния $\Delta(R, E)$ непокрытого объекта. Для каждого номинального признака в предикат добавляется значение этого признака на объекте E, а для числового — отрезок предиката расширяется таким образом, чтобы значение признака объекта E попадало в интервал. После этого происходит удаление тех правил, которые полностью поглащаются хотя бы одним другим правилом.

На Рис. 3 представлен результат эксперимента для алгоритма RISE. Видно, что он делает ошибки на старых объектах, поэтому его использование в системе затруднительно.

Алгоритм ITI строит бинарное решающее дерево. В узлах дерева хранятся простые предикаты для одного признака. Для номинальных признаков — это проверка на равенство одному из его значений, а для числовых — неравенство вида $[x_i < a]$. В листьях дерева накапливаются объекты одного класса. Построение дерева инкрементно: при поступлении нового объекта происходит его классификация с использованием дерева; когда объект достигает листа дерева, осуществляется проверка на совпадение класса, обозначенного в листе, с классом объекта. При совпадении новый объект добавляется в лист, иначе лист преобразуется в узел. Предикат p нового узла выбирается на основе множества объектов X, хранящихся в листе, так, чтобы он был наиболее информативен с точки зрения энтропийного критерия информативности

$$I_p(X) = \frac{|X_+|}{|X|} I(X_+) + \frac{|X_-|}{|X|} I(X_-),$$

где X_+ и X_- — множества, объекты которых предикат p выделяет и не выделяет соответственно. Для K классов $C_1, \ldots, C_K$ информативность множества S задается по формуле

$$I(S) = -\sum_{j=1}^{K} \frac{|C_j \cap S|}{|S|} \log \frac{|C_j \cap S|}{|S|}.$$

Когда условие установлено, образуются два листа, исходящих из нового узла, в которые записываются множества объектов X_+ и X_-.

Результаты эксперимента с алгоритмом ITI представлены на Рис. 4. На графике видно, что значение ошибки на новых объектах монотонно падает, а график ошибки на старых объектах совпадает с осью абсцисс.

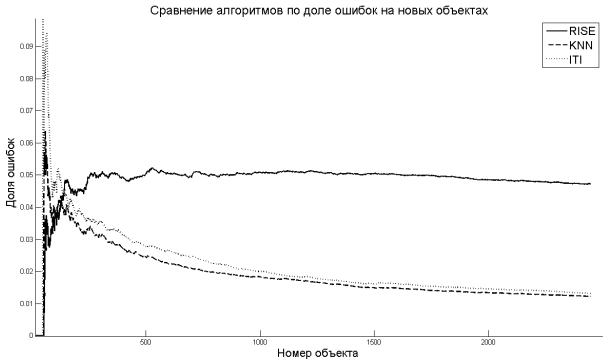


Рис. 5. Сравнение алгоритмов по числу ошибок на новых объектах.

Сравнение алгоритмов. На Рис. 5 приведены графики ошибок на новых объектах для всех алгоритмов. Худший результат показал алгоритм RISE — среднее значение ошибки стабилизировалось на уровне 5%.

Значение ошибки на новых объектах у алгоритмов kNN и ITI было примерно одинаковым, на уровне 2%. При этом алгоритм ITI показал хорошую скорость работы, и это позволяет использовать его в дальнейших исследованиях и разработке системы распознавания таблиц.

Заключение

В статье рассмотрены задачи динамического обучения, решаемые в системе распознавания статистических таблиц. Описана процедура формирования обучающей выборки и классификации, приведены примеры задач динамического обучения. Сравнительный анализ трёх алгоритмов динамического обучения показал, что целесообразность использования алгоритма ITI.

Литература

[1] *Кудинов П. Ю.* Задача распознавания статистических таблиц // Математические методы распознавания образов-14. М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 552–555.

[2] *Blum A.* On-Line Algorithms in Machine Learning // Carnegie Mellon University, Pittsburgh PA. — 15213.

[3] *Domingos P.* Rule Induction and Instance-Based Learning: A Unified Approach // Department of Information and Computer Science University of California, Irvine, California 92717, U.S.A.

[4] *Utgoff P. E.* An Improved Algorithm for Incremental Induction of Decision Trees // 1994, Department of Computer Science, University of Massachusetts, Amherst, MA 01003.

[5] *Utgoff P. E., Berkman N. C., Clouse J. A.* Decision tree induction based on efficient tree restructuring // Machine Learning. — 1997. — No. 29, Pp. 5–44.

Семантическая схожесть текстов в задаче автоматизированного контроля знаний*

Михайлов Д. В., Емельянов Г. М.
Dmitry.Mikhaylov@novsu.ru
Великий Новгород, ГОУ ВПО «Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»

В данной статье описывается применение методов Анализа Формальных Понятий для интерпретации результатов тестов открытой формы в системах контроля знаний. Вводится мера семантической схожести между ответом обучаемого и вариантом правильного ответа, задаваемого разработчиком теста.

Semantic affinity of texts in a problem of computer-aided testing of knowledge*

Mikhaylov D. V., Emelyanov G. M.
Yaroslav-the-Wise Novgorod State University, Veliky Novgorod, Russia

The approach offered is to apply the methods of Formal Concept Analysis for interpretation of the results of open form's test task in system of computer-aided testing of knowledge. The measure of semantic affinity between trainee's answer and correct answer's variant given by test's developer, is introduced.

Тестовое задание открытой формы [4] в системе контроля знаний предполагает ответ обучаемого в виде одного или нескольких предложений Естественного Языка (ЕЯ). Как правило, разработчик теста формулирует свой вариант правильного ответа на основе собственных знаний по заданной Предметной Области (ПО). Традиционно интерпретация ответа обучаемого здесь заключается в простом поиске среди «правильных» вариантов [3].

Актуальная при этом *проблема* адекватности результатов тестирования обусловлена как лексико-функциональной синонимией [2] в ответах, так и недостаточным задействием предметных знаний.

В настоящей работе рассматривается анализ степени близости ответа обучаемого заданному эталону с помощью тезауруса, формируемого на основе множеств вариантов правильных ответов по совокупности тестов заданной тематики

Постановка задачи

Положим отдельный факт некоторой ПО описанным множеством Семантически Эквивалентных (СЭ) ЕЯ-фраз, которые определяют Ситуацию Языкового Употребления (СЯУ, [2]). Представим языковой контекст, фиксируемый СЯУ, посредством тройки вида

$$K = (G, M, I), \tag{1}$$

именуемой Формальным Контекстом (ФК, [1]).

При этом множество объектов G составляют основы слов, синтаксически подчиненных другим словам из СЭ-фраз, задающих СЯУ. Множество признаков M включает в себя подмножества, обозначаемые далее посредством M с соответствующим нижним индексом и содержащие:

Работа выполнена при поддержке УНИК НовГУ и РФФИ, проект № 10-01-00146.

- указания на основу синтаксически главного слова (M_1);
- указания на флексию главного слова (M_2);
- связи «основа–флексия» для синтаксически главного слова (M_3);
- сочетания флексий зависимого и главного слова (M_4). При этом после флексии главного слова через двоеточие указывается предлог (если такой имеется) для связи главного слова с зависимым;
- указания на флексию зависимого слова (M_5).

Рассмотрим совокупность СЯУ для известных фактов заданной предметной области как основу формирования тезауруса. Будем рассматривать модель тезауруса в виде формального контекста:

$$K^H = (G^H, M^H, I^H), \tag{2}$$

где множество G^H состоит из символьных пометок отдельных СЯУ. Множество M^H содержит элементы множеств признаков ФК вида (1) всех $g^H \in G^H$. Кроме того, в составе M^H выделяются:

- множество указаний на основы слов, синтаксически подчиненных другим словам в ЕЯ-описаниях ситуаций $g^H \in G^H$. Фактически данное множество, обозначаемое далее как M_6, содержит указания на объекты ФК вида (1), генерируемых для элементов множества G^H;
- множество связей «основа–флексия» для синтаксически зависимого слова, M_7;
- множество сочетаний основ зависимого и главного слова, M_8.

Отношения $I \subseteq G \times M$ и $I^H \subseteq G^H \times M^H$ ставят в соответствие объектам множеств G и G^H их признаки из множеств M и M^H, соответственно. При этом ФК обоих видов могут быть сформированы по результатам синтаксического анали-

за соответствующих ЕЯ-фраз. В настоящей работе мы рассмотрим *совместное использование моделей* (1) *и* (2) для вычисления *меры схожести СЯУ* при интерпретации тестового задания открытой формы.

Методы решения

Пусть $K^E = \left(G^E, M^E, I^E\right)$ есть ФК вида (1) для СЯУ S_1, соответствующей сформулированному разработчиком теста варианту правильного ответа. Введем также в рассмотрение аналогичную структуру $K^X = \left(G^X, M^X, I^X\right)$ для СЯУ S_2, задаваемой ответом обучаемого.

Обозначим множество, получаемое объединением множеств M_6, M_7, M_8, M_4^E, M_4^X, M_5^E и M_5^X, как M^U. Введем также обозначения для используемых далее символьных констант: p_{fl} — для «флексия:», p_{bs} — для «главное-основа:», p_{b} — для «основа:», а для операции конкатенации — символ $\odot$.

Определение 1. *Будем считать, что СЯУ S_1 и S_2 связаны отношением схожести, если каждому объекту $g^X \in G^X$ соответствует такой объект $g^E \in G^E$, что выполняется одно из следующих условий:*

1) *$g^X = g^E$ и любой признак $m^E \in M^E$ объекта g^E будет относиться и к объекту g^X.*
2) *$g^X = g^E$, при этом Условие 1) не выполняется, но существует объект $g^H \in G^H$, обладающий признаком $m_1^H \in M_6 \colon m_1^H = p_{\text{b}} \odot g^E$ при обязательном выполнении следующих условий:*

$$\left(\exists\, m_{\text{fl}}^E \in M_5^E \colon m_{\text{fl}}^E = p_{\text{fl}} \odot f^E\right) \rightarrow \left(\exists\, m_{17}^H \in M_7 \colon m_{17}^H = g^E \odot «:» \odot f^E\right),$$

при этом $\left(I^E\left(g^E, m_{\text{fl}}^E\right) \wedge I^X\left(g^E, m_{\text{fl}}^E\right)\right) \rightarrow I^H\left(g^H, m_{17}^H\right)$;

$$\left(\exists\, m_{\text{bs}}^E \in M_1^E \colon m_{\text{bs}}^E = p_{\text{bs}} \odot b^E\right) \rightarrow \left(\exists\, m_{18}^H \in M_8 \colon m_{18}^H = g^E \odot «:» \odot b^E\right),$$

при этом $I^E\left(g^E, m_{\text{bs}}^E\right) \rightarrow I^H\left(g^H, m_{18}^H\right)$;

$$\left(\exists\, m_{\text{bs}}^X \in M_1^X \colon m_{\text{bs}}^X = p_{\text{bs}} \odot b^X\right) \rightarrow \left(\exists\, m_{28}^H \in M_8 \colon m_{28}^H = g^E \odot «:» \odot b^X\right),$$

при этом $I^X\left(g^E, m_{\text{bs}}^X\right) \rightarrow I^H\left(g^H, m_{28}^H\right)$.

Кроме того, для $\forall\, m^H \in \left(M^H \backslash M^U\right)$ *верно:*

$$I^H\left(g^H, m^H\right) \rightarrow \left(I^E\left(g^E, m^H\right) \wedge I^X\left(g^E, m^H\right)\right). \quad (3)$$

В содержательном плане Условие 2) настоящего Определения описывает случай наличия синонимов среди слов, синтаксически главных по отношению к словам со сходными основами. При этом основы g^X и g^E не омонимичны, поскольку было бы нарушено требование разделения ими признаков главного слова.

3) *$g^X \neq g^E$, но существует объект $g^H \in G^H$, обладающий признаками $m_1^H \in M_6 \colon m_1^H = p_{\text{b}} \odot g^E$ и $m_2^H \in M_6 \colon m_2^H = p_{\text{b}} \odot g^X$, при этом для любого признака $m^H \in \left(M^H \backslash M^U\right)$ справедливо:*

$$I^H\left(g^H, m^H\right) \rightarrow \left(I^E\left(g^E, m^H\right) \wedge I^X\left(g^X, m^H\right)\right). \quad (4)$$

4) *$g^X \neq g^E$, но существует объект $g_1^H \in G^H$, обладающий признаком $m_1^H \in M_6 \colon m_1^H = p_{\text{b}} \odot g^E$, а для $\forall\, m^E \in \left(M_4^E \cup M_5^E\right)$ справедливо:*

$$\left(I^H\left(g_1^H, m_1^H\right) \wedge I^E\left(g^E, m^E\right)\right) \rightarrow I^H\left(g_1^H, m^E\right).$$

При этом существуют признаки $m_2^H \in M_6$ и $m^X \in \left(M_1^X \cup M_2^X \cup M_3^X\right)$, для которых верно:

$$\left(I^H\left(g_1^H, m_2^H\right) \wedge I^X\left(g^X, m^X\right)\right) \rightarrow I^H\left(g_1^H, m^X\right),$$

где $m_2^H = p_{\text{b}} \odot g^{X_1}$, $g^{X_1} \neq g^X$, а пара $\left(g^{X_1}, g^E\right)$ отвечает Условию 3) настоящего Определения при генерации формального контекста вида (1) *для объекта g_1^H. В то же время существует объект $g_2^H \in G^H$, относительно которого пара $\left(g^X, g^{X_1}\right)$ также будет отвечать Условию 3) настоящего Определения. Генерируемый при этом формальный контекст вида* (1) *для объекта g_2^H будем обозначать далее как K^{X_1}. По аналогии с K^E и K^X, $K^{X_1} = \left(G^{X_1}, M^{X_1}, I^{X_1}\right)$.*

Замечание 1. Анализ схожести S_1 и S_2 включает сравнение последовательностей двух и более соподчиненных слов. Пример: *«средняя ошибка на обучающей выборке»* $\Leftrightarrow$ *«эмпирический риск»*. Выполнимость условий *Определения 1* здесь анализируется только для главных слов (в примере это *«ошибка»* и *«риск»*). Сами последовательности считаются взаимно заменяемыми, если возможно их построение по ФК (2) на наборе признаков с префиксом p_{bs} для одной и той же СЯУ. При этом главные слова последовательностей должны быть одинаково подчинены одному и тому же слову, что проверяется по сочетанию флексий.

Как следует из *Определения 1*, оценка схожести СЯУ производится относительно классов Формальных Понятий (ФП) для формальных контекстов K^E и K^X, соответственно. Каждое ФП формального контекста вида (1) есть пара множеств (A, B), называемых объемом и содержанием [1], причем существуют отображения:

$$A' = \{m \in M \,|\, \forall\, g \in A \colon gIm\} \text{ и}$$
$$B' = \{g \in G \,|\, \forall\, m \in B \colon gIm\}, \text{ где } A' = B \text{ и } B' = A.$$

Множество всех ФП формального контекста вместе с отношением порядка называют *решеткой ФП*.

Классы понятий в решетке для формального контекста вида (1) различаются степенью абстракции, которая зависит от частоты употребления главных слов рассматриваемых сочетаний в различных синтаксических контекстах.

Схожесть СЯУ оценивается относительно классов формальных понятий одного уровня абстракции, соответствующих подчинению существительных тем словам, которые называют ситуацию, но не входят в Расщепленные Предикатные Значения (РПЗ). Каждое РПЗ есть совокупность вспомогательного глагола (связки) и некоторого существительного, называющего ситуацию. Выделение объектов и признаков РПЗ из структуры (1) основано на следующей теореме.

Теорема 1. *Пусть* $\{m_1, m_2, m_3\} \subset M_1$. *Если считать признаки* m_1, m_2 *и* m_3 *взаимно различными, то* m_1 *соответствует указанию на основу главного,* m_2 *— зависимого слова РПЗ, а* m_3 *— указанию на основу однословного смыслового эквивалента этого РПЗ при выполнении трех условий:*

1) $\exists\, g_1 \in G$: $I(g_1, m_1) = \text{true}$, $I(g_1, m_3) = \text{false}$, $m_2 = p_{\text{bs}} \odot g_1$;
2) $\exists\, \{g_2, g_3\} \subset G$, *при этом объекты* g_1, g_2 *и* g_3 *взаимно различны, а*

$$I(g_2, m_3) \wedge I(g_3, m_3) \wedge \\ \wedge \big(I(g_2, m_1) \wedge I(g_3, m_2) \vee \\ \vee I(g_2, m_2) \wedge I(g_3, m_1)\big) = \text{true};$$

3) *не существует других троек объектов, для которых признак* m_3 *занимал бы место либо признака* m_1, *либо признака* m_2 *в вышеуказанных соотношениях.*

После удаления информации РПЗ формальный контекст (1) отражает классы отношений, определяемых ролями участников описываемой ситуации действительности по отношению к ней самой.

Мера схожести S_1 и S_2 относительно формальных контекстов K^E и K^X, из которых удалена информация РПЗ, определяется по формуле:

$$\text{spc}(S_1, S_2) = \frac{\sum_{k=1}^{n} \text{spc}_k}{n}, \qquad (5)$$

где $n = \left|G^X\right|$, а spc_k есть мера мера схожести объектов в паре $\left(g_k^X, g^E\right)$. В зависимости от выполнимости условий *Определения 1*, значение spc_k:

— равно 1.0, если выполнено *Условие 1)*;
— вычисляется по формуле:

$$-\log_2\left(1 - \frac{D_c}{\text{path}_C}\right) \times \\ \times \frac{\left|B^C\right|}{|B_1 \backslash B^C| + |B_2 \backslash B^C| + |B^C|}, \qquad (6)$$

если выполнено *Условие 2), 3), либо 4).*

Во втором случае мы имеем дело с гипотетической решеткой ФП (обозначим ее как Re^{XE}), в которой объемы объектных ФП (ФП с одним объектом в объеме) есть $\left\{g_k^X\right\}$ и $\left\{g^E\right\}$ (при выполнении *Условия 2)* или *3)*), либо $\left\{g_k^X\right\}$, $\left\{g^E\right\}$ и $\left\{g^{X_1}\right\}$ (при выполнении *Условия 4)*). Значение D_c равно количеству сравнимых ФП, составляющих цепочку с вершинным ФП решетки Re^{XE} в качестве максимального ФП и Наименьшим Общим Суперпонятием (НОСП) для объектных ФП решетки Re^{XE} — в качестве минимального ФП. Множество B^C есть содержание этого НОСП, а число path_C равно минимальному количеству ФП в цепочке, которой принадлежит вершинное ФП, наименьшее ФП решетки Re^{XE} и ФП с содержанием B^C.

В случае истинности любого из *Условий 2)–4) Определения 1* значение $D_c = 2$.

При выполнении *Условия 2)* либо *3)* число $\text{path}_C = 4$, а в множество B^C войдут признаки $m^H \in \left(M^H \backslash M^U\right)$, для каждого из которых справедливо либо соотношение (3) (при выполнении *Условия 2)*), либо соотношение (4) (при выполнении *Условия 3)*). При этом

$$B_1 = \left\{ m^E : m^E \in \left(M_1^E \cup M_2^E \cup M_3^E \right), \right. \\ \left. I^E\left(g^E, m^E\right) = \text{true} \right\},$$

$$B_2 = \left\{ m^X : m^X \in \left(M_1^X \cup M_2^X \cup M_3^X \right), \right. \\ \left. I^X\left(g_k^X, m^X\right) = \text{true} \right\}.$$

Выполнимость *Условия 4)* обычно проверяется в несколько итераций. Причем в ходе очередной итерации число признаков, не являющихся общими для g_k^X и g^{X_1}, всегда меньше, чем в предыдущей. Начальное значение $\text{path}_C = 4$ и с каждым шагом возрастает на 1. При истинном *Условии 4)*

$$B_1 = \left\{ m^{X_1} : m^{X_1} \in \left(M_1^{X_1} \cup M_2^{X_1} \cup M_3^{X_1} \right), \right. \\ \left. I^{X_1}\left(g^{X_1}, m^{X_1}\right) = \text{true} \right\},$$

$$B_2 = \left\{ m^X : m^X \in \left(M_1^{X_1} \cup M_2^{X_1} \cup M_3^{X_1} \right), \right. \\ \left. I^{X_1}\left(g_k^X, m^X\right) = \text{true} \right\},$$

где $\left(M_1^{X_1} \cup M_2^{X_1} \cup M_3^{X_1}\right) \subset M^{X_1}$ в соответствии с показанным выше разделением множества признаков формального контекста вида (1). Множество B^C здесь есть пересечение B_1 и B_2.

Значения $|B_1|$ и $|B_2|$ в формуле (6) будут тем больше, чем большее число слов могут быть синтаксически главными по отношению к каждому из слов для пары $\left(g_k^X, g^E\right)$. При этом величина $\left|B^C\right|$ отражает взаимную специфичность понятий, обозначаемых g_k^X и g^E.

Пример интерпретации теста

Пусть СЯУ S_1 задана четырьмя простыми распространенными предложениями, представляющими правильный ответ на вопрос о связи переобучения и эмпирического риска. Допустим, имеются

три варианта СЯУ S_2 (см. таблицу 1), связанные отношением схожести с S_1 согласно *Определению 1.*

Таблица 1. Сравнение ответов с эталоном.

ответы	эталон				анализируемый		
вариант	1	2	3	4	1	2	3
основа	флективная часть + предлог						
заниженн	ости	ости	ость	ость	ость	ость	ости
эмпирическ	ого	ого	ого	ого	—	—	—
риск	а	а	а	а	—	—	—
средн	—	—	—	—	ей	ей	ей
ошибк	—	—	—	—	и:на	и:на	и:на
обучающ	—	—	—	—	ей	ей	ей
выборк	—	—	—	—	е	е	е
переобучени	е	—	—	ем	ем	—	е
переподгонк	—	а	ой	—	—	ой	—
связан	—	—	а:с	а:с	а:с	а:с	—
привод	ит:к	ит:к	—	—	—	—	ит:к

Фрагмент тезауруса, задействованный в доказательстве схожести СЯУ, представлен в таблице 2 ЕЯ-описанием соответствующих фактов.

Таблица 2. Факты ПО для фрагмента тезауруса.

№п/п	1				2	3		4	
основа	флективная часть + предлог								
заниженн	ость	ость	ости	ости	—	ость	ости	ость	ость
оценк	—	—	—	—	—	и	и	и	и
эмпирическ	ого	—	ого	—	—	—	—	—	—
риск	а	—	а	—	—	—	—	—	—
средн	—	ей	—	ей	—	—	—	—	—
ошибк	—	и:на	—	и:на	—	—	—	и	и
распознавани	—	—	—	—	—	—	—	я	я
обучающ	—	ей	—	ей	—	—	—	—	—
выборк	—	е	—	е	—	—	—	—	—
переусложнени	ем	ем	е	е	—	—	—	—	—
модел	и	и	и	и	—	—	—	—	—
уменьшени	—	—	—	—	е	—	—	—	—
обобщающ	—	—	—	—	ей	ей	ей	—	—
способност	—	—	—	—	и	и	и	—	—
выбор	—	—	—	—	—	—	—	ом	а
решающ	—	—	—	—	его	—	—	его	его
дерев	—	—	—	—	а	—	—	—	—
правил	—	—	—	—	—	—	—	а	а
алгоритм	—	—	—	—	—	а	а	—	—
переподгонк	—	—	—	—	ой	ой	а	—	—
переобучени	—	—	—	—	—	ем	е	—	—
связан	а:с	а:с	—	—	о:с	а:с	—	а:с	—
вызван	а	а	—	—	—	а	—	—	—
обусловлен	а	а	—	—	о	—	—	—	—
привод	—	—	ит:к	ит:к	—	—	ит:к	—	—
завис	—	—	—	—	—	—	—	—	ит:от

Используемые в работе ФК строились по результатам синтаксического разбора ЕЯ-фраз программой «Cognitive Dwarf» (ООО «Когнитивные технологии», `http://cs.isa.ru:10000/dwarf`).

Таблица 3. Оценка близости ответа эталону.

Вариант	$\mathrm{spc}(S_1, S_2)$	$\lvert B^C\rvert$	$\lvert B_1 \backslash B^C\rvert$	$\lvert B_2 \backslash B^C\rvert$
1	0,9167	7,7500	0,7500	0,0000
2	0,7917	7,0000	2,0000	0,5000
3	0,8750	7,7500	0,7500	0,7500

Как видно из таблицы 3, наибольшее значение схожести с СЯУ S_1 имеет *вариант* 1 анализируемого ответа из представленных в таблице 1. Действительно, для этого варианта мы имеем наибольшее среднее значение $\lvert B^C\rvert$ в формуле (6) при минимальном значении суммы $\lvert B_1 \backslash B^C\rvert$ и $\lvert B_2 \backslash B^C\rvert$ по всем парам $\left(g_k^X, g^E\right)$, для которых выполняется *Условие 2), 3), либо 4) Определения 1.* Причина состоит в том, что признаки объектов формального контекста, соответствующего *варианту* 1 ЕЯ-описания ситуации S_2, разделяются большим количеством объектов формального контекста ситуации S_1, чем признаки у объектов формальных контекстов для *вариантов* 2 и 3. Иными словами, признаки для *варианта* 1 являются более стереотипическими по отношению к ФК ситуации S_1, чем признаки у двух других вариантов.

Заключение

Основной *результат* настоящей работы — *метод анализа схожести ситуаций языкового употребления при их независимом порождении.*

Предложенная теоретико-решеточная *модель тезауруса* может служить основой построения текстовых баз данных по заданной ПО. При этом классам ФП решетки тезауруса соответствуют классы СЭ в ЕЯ, за счет чего обеспечивается оптимальное иерархическое представление информации.

Немаловажную роль при вычислении меры схожести СЯУ играет полнота и непротиворечивость ЕЯ-описания предметных знаний. Модель тезауруса в виде решетки ФП позволяет задействовать, в частности, базис импликаций [1] формального контекста (2) для изучения взаимозаменяемости абстрактных слов в синтаксических контекстах существительных предметной лексики (*«связана с переобучением»*$\Leftrightarrow$*«переобучение приводит (к)»*).

Отдельного рассмотрения заслуживает интеграция предложенного метода с лингвистическими и статистическими методами поиска, используемыми алгоритмом Exactus, `http://www.exactus.ru/`.

Литература

[1] *Ganter B., Wille B.* Formal Concept Analysis — Mathematical Foundations. — Berlin: Springer-Verlag, 1999. — 284 с.

[2] *Михайлов Д. В., Емельянов Г. М.* Морфология и синтаксис в задаче семантической кластеризации // Всеросс. конф. ММРО-14, М.: Макс Пресс, 2009. — С. 563–566.

[3] *Останин К. С.* Система компьютерного тестирования «ТестЭкзаменатор» // Межд. конгресс конференций ИТО-2003. — 2003. — `http://www.bitpro.ru/ito/2003/VI/VI-0-2562.html`.

[4] *Челышкова М. Б.* Теория и практика конструирования педагогических тестов. Учебное пособие. — М.: Логос, 2002. — 431 с.

Intellectualization of group communication and decision support: the decision hedgehog

Patrick Humphreys
p.humphreys@lse.ac.uk
London School of Economics and Political Science, London, UK

This paper proposes a fundamental evolution of the group decision support model from the single "decision-spine" which focuses on a single proceduralised context within a problem-solving paradigm, to provide comprehensive Group Communication and Decision Support (GDACS). It shows how GDACS can support creative decision-making through collaborative authoring of outcomes, within a plethora of decision spines, and also within the rhizome that constitutes the "body-without-organs" of the decision-hedgehog in which these spines are rooted. It positions decision making through the construction of narratives with the fundamental aim of enriching contextual knowledge for decision-making. It describes how localised processes developing proceduralised contexts for constructing and exploring specific prescriptions for action are rooted in this rhizome.

The limitations of rational perspectives of "decision-making as choice" have been raised (Cyert and March, 1992; Nappelbaum, 1997; Carlsson, 2002). The challenges relate to failures of implementation, the rise of unintended outcomes, the impact of cultures of fear and failure within organisations (Humphreys and Nappelbaum, 1997), and problems associated with externalisation of decision systems designers who "play god" by designing from outside the game for those who are inside (Humphreys, 1989). An alternative approach has its origins in the work of Simon (1960), who conceptualised decision making processes as linear, moving through three stages: intelligence, design and choice. Intelligence involves a search for "the conditions that call for decisions". Design focuses on "inventing, developing and analysing possible courses of action" through the construction of "a model of an existing or proposed real-world system". Decision-making is thus cast as problem solving, the model provides a representation of "the problem" which can be "solved by" implementing a prescribed course of action identified as "preferred" or "optimal" within this representation.

Yet, for the participants in the group decision-making process, the "representation of the problem" is cast within the plane of the symbolic/imaginary (Deleuze and Guattari, 1988), as are the prescriptions for action that emanate from its consideration within the group. So the "solution" to the decision problem is chosen on the basis of a collective fantasy by participants who do not always have sufficient resources for adequate "reality testing" before committing to a prescription for action (Humphreys, 1989)

The problem definition process is rooted in participants' issues of concern and spirals within what Nappelbaum (1997) called the circular logic of choice (figure 1): the decision-making group progressively sharpens the description of the problem by cycling through option descriptions, value judgments and instrumental instructions, reducing discretion in how these may be defined in spiralling towards the prescribed choice. (Humphreys and Jones, 2007). At the outset, all imaginable courses of action are candidates for implementation. The group process, aimed at developing a single, collectively agreed, representation of "the problem" then progressively employs problem expressing, framing and fixing processes to strengthen the constraints on how the problem is represented until only one course of action is prescribed: the one which "should be" actually embarked upon in the real. Elsewhere (Humphreys and Jones, 2006, Humphreys, 2007) we have described how these constraints are negotiated and set at five qualitatively different levels of problem representation. These are: level 5: exploring "what needs to be thought about"; level 4: expressing the problem and identifying frames in which it is to be represented; level 3: developing structure within a frame; level 2: exploring what-if questions within the frame, and level 1: making best assessments. The way that participants in the group decision-making process

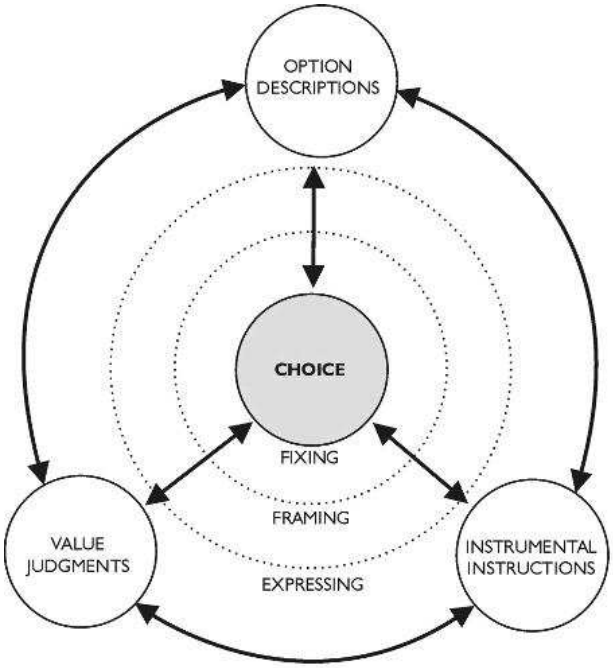


Fig. 1. The Circular Logic of Choice.

agree to set the constraints at these five levels progressively establishes their view of the "truth about the decision situation".

According to Michel Foucault, "truth is a thing of this world: it is produced only by virtue of multiple forms of constraint" (Foucault, 1980, p. 131), and in this sense, all these discourses identified at the various levels, in the problem expressing, framing and fixing processes are involved in moving toward prescribing the one and only best course of action (the "true solution"), can be considered as particularised and, sometimes, artificial discourses of truth. Conversely, the representation of the problem constructed through the use of this discourse does not reveal the "real" situation. Rather it is an artefact, which, as has been discussed elsewhere (Humphreys, 1998), is generally advanced, in organisational communications, through the other, more general, kinds of discourse of truth which may be coercive or rely upon cycles of seduction, challenge and ruse between those people who are party to the decision. In practice, decision-making processes founded in the circular logic of choice spiral within five levels of increasing constraint in problem representation, though a decision-spine, located in the symbolic-imaginary, capable of "pricking the real" at its point. The decision-spine is named by analogy with the structure and characteristics, in the real world, of an uprooted spine from a hedgehog, as illustrated in figure 2.

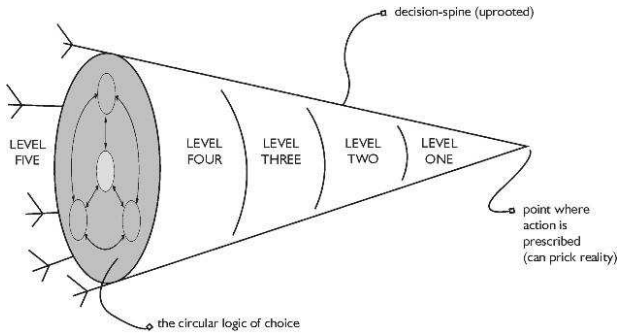


Fig. 2. Decision-spine.

The decision hedgehog

Located within the plane of the symbolic-imaginary, the decision spine is rooted in cognitive operations at level 5 — exploring what needs to be thought about- (see figure 2), Such explorations are not necessarily bounded within the spine, but can extend throughout the unbounded body of an imaginary and symbolic decision-hedgehog — a "body without organs" in the language of Deleuze and Guattari (1988, pp 149-166). If we want to provide effective support for innovative and creative, rather than merely prescriptive, decision making, then we need to understand how cognitive operations beyond the spine provide the impetus for innovative and creative decision-making — understood as a rich and continuing process at the core of organisational and social life.

According to the conventional decision-theoretic logic, the act of choice within a single decision spine (i.e., gaining commitment of the participating group to implement the course of action prescribed within the spine as "preferred" or "optimal") "solves the problem" and therefore terminates the decision-making and the processes that support it (Phillips, 1988, Kleindorfer, Kunreuther and Schoemaker, 1993). Narrative accounts of the decision making process that led to the chosen action tend to be justificatory (Humphreys, 1998). These justificatory stories trace back along paths framed within the decision spine, starting from the point of choice, ignoring (as "irrelevant" or "confusing") any narratives that traverse pathways that were not constrained within the spine. This is a major contributor to the failures of effort to support decision-making, predicated on this logic, which were identified by Humphreys and Nappelbaum (1997).

Conceptualising decision making as "learning" (Argyris and Schon, 1996, Senge, 2003) requires gaining feed back from the effects of embarking on "chosen" courses of action (pricking the real to gain information) that is not treated in isolation, like a diagnosis. Instead, this process, to allow learning through generating new knowledge relevant to decision making, must extend the rhizome (Deleuze and Guattari, 1988) that constitutes the body-without-organs of the decision-hedgehog in which the roots of the decision spines are located, enriching the contextual knowledge for subsequent decision making along a plethora of other spines rooted in this rhizome (figure 3). But the decision-hedgehog rhizome is not simply a reference structure or high-level frame informing the selection of decision spine. At the personal level in creative decision-making, the decision hedgehog rhizome is experienced as a map formed through exploring potential pathways to develop contextual knowledge, rather than as a tracing of "reality". Resources for conceptualisation of collaborative outcomes may be innovatively accessed and their transformation imagined through voyages along these pathways, doubled in imagination and in reality. . At the social level in creative decision making, the rhizome is activated, extended and revised by the participants in the group, through making and exchanging stories about discovery and innovation in the conceptualisation, utilisation and transformation of resources for living. When they are authored in multimedia, these stories involve showing as well as telling what is, and what could be, thus enriching context — rather than being told what should be, thus proceduralising particular aspects of context (Humphreys, Lorac and Ramella, 2001; Humphreys and Brezillon, 2002).

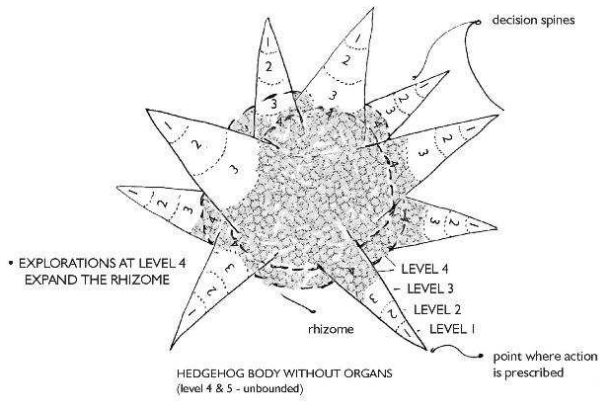


Fig. 3. Decision-hedgehog cross-section: Decision-spines rooted in the rhizome.

Story-telling in creative decision making

In creative decision making, the fundamental dilemma about how to proceed, at least at the outset is: whether to aim for immediate decision taking (action) by spiralling down a decision spine, with the aim to "prick the real" or whether to nurture the decision hedgehog's body-without-organs by telling and exchanging stories which nurtures the decision hedgehog's rhizome: increasing its semantic diversity and intensity of connections. Thus two kinds of story telling are intertwined in creative decision-making: These are (i) Telling and exchanging stories that support the process of spiralling down a spine to "prick the real", and the interpretation of the subsequent impact of the decision on local reality, and (ii) Telling and exchanging stories that nurture the decision-hedgehog, as collaborating groups construct maps of potential possibilities and opportunities, thus enriching contextual knowledge. Creative decision-making does not presume the hegemony of either type of outcome in directing the design of decision-making processes and support for these processes. Rather, it aims for a dynamic balance between them, through the manner in which the processes supporting their generation are designed.

The fundamental aim of storytelling that nurtures the decision hedgehog is to enrich contextual knowledge for decision making through authoring of narratives within the rhizome. This story telling activity can be linked with localised processes involved in proceduralising parts of this contextual knowledge, on a conditional basis, in constructing and exploring decision-spines. All these processes are doubled in the parallel planes of the imaginary/symbolic and the real (Deleuze and Guattari, 1988, Humphreys and Jones, 2006). In reality, participants engage in story telling as associated creative activities involving improvisation and communication in rich media. They work with imaginary ideas and develop a variety of open symbolic representations (plateaus) within the rhizome. When we communicate these, we engage in real authoring activities using our imagination to create symbolic content and our production skills to communicate this content as mediated narrative.

Group decision authoring and communication support (GDACS)

GDACS (Humphreys and Jones, 2006, Humphreys, 2007) supports creative authoring: enriching contextual knowledge that can both inform and improve the process of developing proceduralised context at levels 5 and 4 within a decision spine and also nurture the rhizome wherein decision-spines are rooted in the Decision-Hedgehog's body-without organs. GDACS provides comprehensive support for these processes through the convergence of the processes shown in figure 4. Facilitating Environments for GDACS range from purpose built decision conferencing rooms and "Pods" (Phillips, 1989), Accelerated Solutions Environments (Jones and Lyden-Cowan, 2002) and Flexible Learning Environments (Jones, 2005) to wireless hotspots and public infrastructure designed by architects to enable group work in the internet-enabled laptop age. Such environments typically create knowledge-rich arenas, involve interactive technology, and feedback systems (visual and data). Event design and production support may be provided, together with spatial facilitation of group, private and interpersonal work (Humphreys and Jones, 2006). The use of participatory multimedia and authoring in rich language enables us to create a stage on which the players, actors, authors, stagehands and audience are all present The collaborative interactions that elicit conditions of "coming to know" in constructing the rhizome that provides the pathways connecting the background with the actors and improvisation on the stage (mise-en-scene), and the crafts associated with production of artefacts in the foreground combine to enable sense-making and contingent encounters with the real.

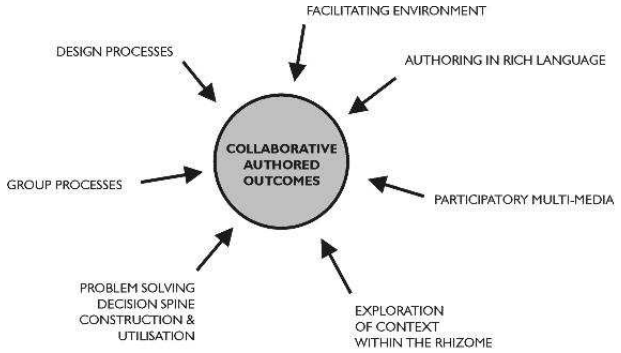


Fig. 4. Converging Processes in GDACS.

The language of the design process has emerged as a means by which groups socially construct outcomes at every level of GDACS. Such language is used to en-

able the design of procedures for decision-making as well as providing frames within which the decisions may be manifest — supporting rapid iterative cycles of decision-making, anchored within artefacts leading in turn to rapid cycles of reflection and reaction. Use of rich, audiovisual language in authorship and production in multimedia within GDACS provides a rich set of constructs, better equipping us to co-author collaborative outcomes, showing as well as telling what is and what could be (Humphreys and Brezillon, 2002).

References

[1] *Argyris C., Schon D.* Organizational learning II: theory, method, and practice. — Reading, MA: Addison-Wesley Longman, 1996.

[2] *Carlsson S.* Designing DSS based on an attention based view of the firm // Adam F., Brezillon P., Humphreys P. and Pomerol J.-C. (Eds.) Decision making and decision support in the internet age. Cork, Ireland: Oaktree Press, 2002.

[3] *Cyert R. M., March J. G.* A behavioral theory of the firm, (2nd ed). — Cambridge, MA: Blackwell Business, 1992.

[4] *Deleuze G., Guattari F.* A thousand plateaus (Capitalism and schizophrenia, Vol. II). — London: The Athlone Press, 1988.

[5] *Foucault M.* Power/Knowledge: Selected interviews and other writings. — New York: Pantheon, 1980.

[6] *Humphreys P. C.* Intelligence in decision support: A process model // Doukidis G., Land F., Miller G. (Eds.) Knowledge based management support systems. — Chichester: Ellis Horwood, 1989.

[7] *Humphreys P. C.* Discourses underpinning decision support // Berkeley, Widmeyer G., Brezillon P., Rajkovic V. (Eds.) Context sensitive decision support systems. London: Chapman & Hall, 1998.

[8] *Humphreys P. C., Brezillon P.* Combining rich and restricted languages in multimedia: Enrichment of context for innovative decisions // Adam F., Brezillon P., Humphreys P. and Pomerol, J-C (Eds.) Decision making and decision support in the internet age. Cork, Ireland: Oaktree Press, 2002.

[9] *Humphreys P. C., Jones G. A.* The evolution of group support systems to enable collaborative authoring of outcomes // World Futures, 62, 1–30, 2006.

[10] *Humphreys P. C., Lorac C., Ramella M.* Creative support for innovative decision making // Journal of Decision Systems, 10, 241–264, 2001.

[11] *Humphreys P. C., Nappelbaum E.* Structure and communications in the process of organisational change // Humphreys P., Ayestaran S., McCosh A., Mayon-White B. (Eds.), Decision support in organisational transformation. London: Chapman and Hall, 1997.

[12] *Jones G. A.* Learning environments for collaborative authored outcomes. — Research Report LML-LUDIC-RR-002. London: London Multimedia Lab for Audiovisual Composition and Communicatio, 2005.

[13] *Jones G. A., Lyden-Cowan C.* The Bridge: activating potent decision making in organizations // Humphreys P., Ayestaran S., McCosh A., Mayon-White B. (Eds.), Decision support in organisational transformation. London: Chapman and Hall, 1997.

[14] *Kleindorfer P. R., Kunreuther H. C., Shoemaker P. H.* Decision sciences: an integrative perspective. — Cambridge: Cambridge University Press, 1993.

[15] *Nappelbaum E. L.* Systems logic for problem formulation and choice. // Humphreys P., Ayestaran S., McCosh A., Mayon-White B. (Eds.), Decision support in organisational transformation. London: Chapman and Hall, 1997.

[16] *Phillips L. D.* People-centred group decision support // Doukidis G., Land F., Miller G. (Eds.) Knowledge management support systems. Chichester: Ellis Horwood, 1989.

[17] *Senge P.* The fifth discipline fieldbook. — London: Nicholas Brealey Publishing, 2003.

[18] *Simon H. A.* The new science of management decision. — New York: Harper & Row, 1960.

Modeling of the traffic emission load from data of the toll gates system*

Derbek P., Hrubes P.
derbek@lss.fd.cvut.cz, hrubes@fd.cvut.cz
Faculty of Transportation Sciences, Czech Technical University, Prague, Czech Republic

The paper presents a model of the emission load in vicinity of one monitored road in relation with real traffic input data. It describes a simple method of the emission load estimate. In addition to the modeling method itself, the paper describes particular methodologies of the real data conversion and processing. Traffic intensities of the heavy trucks over 12 tons of weight are discussed. The model uses the real traffic data files from intelligent traffic systems localized by the monitored roads as its input. In this work the data from selected highway toll gates were used.

Introduction

A continuously increasing road traffic brings higher pollution in the vicinity of the roads and emissions are spread in dependence on weather conditions. This effect has impact on urban areas near the roads and brings worse environmental conditions in neighborhood of roads in general.

To deal with this effect, it is necessary to understand existing pollution processes, to be able to recognize particular pollutant sources, to be able to realize and measure individual pollution factors etc.

Ideas are deeply extended in topics of toll gate system data, its availability, usage and accuracy. These are discussed in relation to the emission maps modeling and traffic intensities estimation.

Moreover, relevant data from the selected Czech highway toll gates were used to generate graphical outputs as examples. In the paper, various generated emission maps present the model outputs for different emission factors.

Model

Presented model is a part of the starting project SGS 2010, CTU in Prague. The aim of the emission load model in this stage of development is to process already captured data of these main measurable pollution factors: *C20H12*, *NO2*, *PM10*, *SO2*. The concept of the model is as shown below.

Emission Load Model Description. The emission load E_{dtpi} for day type d (Mon, ..., Sun), time of day t, pollutant p and road inclination i is estimated using the model

$$E_{dtpi} = I_{dt} \times e_{pi}.$$

Symbol I_{dt} denotes an average of the traffic intensities in both directions for the given day type and time of day. By e_{pi} we denote the coefficient corresponding to a selected emission factor and given road inclination. (Coefficients e may depend, in general, on the car type and velocity, too. In this state, our model is simplified, considering only registered heavy trucks at 80 km/h speed.)

Input Data

Public data sets aggregated from 34 Czech D1 highway toll gates of the time period from January 1, 2007 to March 6, 2007 were used. Registered intensities of the heavy trucks (over 12 tons of the weight) were taken for model testing. A table with identification, kilometric and location localization of particular toll gates was attached to the data sets. Coefficients for the emission factors were used from results of another project.

Traffic Intensity Estimation. Provided intensity data sets for heavy truck traffic can be easily represented in joint time-space graphs. Data file of intensities is arranged in following format:

— Date (secondarily the day type as well),
— Time (when the intensity was taken),
— ID for the each toll gate,
— Traffic intensity value.

Intensities in original provided data sets are subdivided into two groups according to the traffic direction.

The intensities, each for the separate traffic direction and for assessed day type is always created as an average value of all particular intensities in same day type and it is specified in the source file by date. An example for the day type "Friday" is presented in our model.

The colored scale shows the traffic intensity, see Fig. 1. Scale is described by red through yellow, orange, green and blue to violet (values 0–130). Values of intensities are represented as number of heavy trucks passed the gate in each previous 15 minutes. To view the colored figures refer to the PDF version of the IIP conference proceedings.

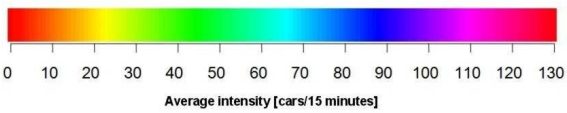


Fig. 1. Scale for the traffic intensity of heavy trucks (over 12 tons).

This work was supported by the COST program, project OC 194, from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic.

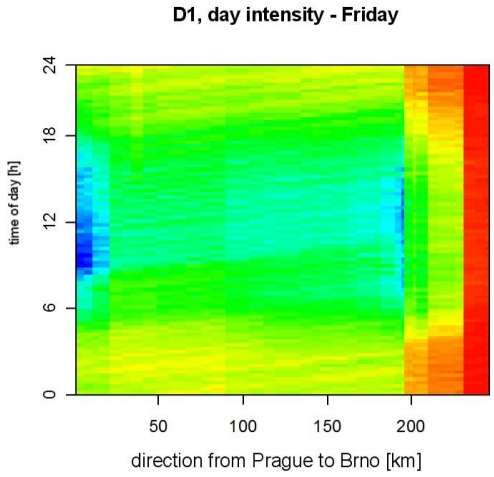


Fig. 2. Average day intensity for the day type "Friday" in direction Prague to Brno.

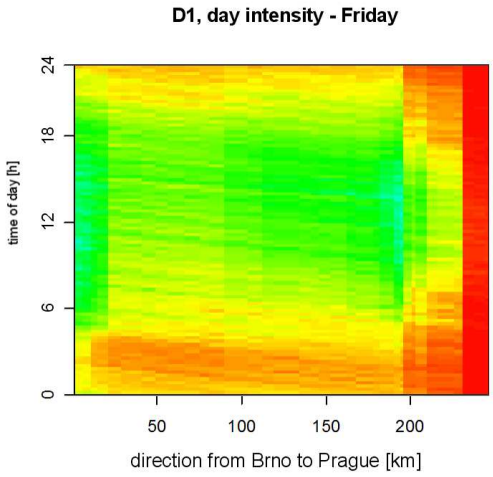


Fig. 3. Average day intensity for the day type "Friday" in direction Brno to Prague.

Table 1. Values of average vehicle intensities over the 12 tons of weight proceed in range for Prague to Brno.

Min.	1st Qu.	Med.	Avrg.	3rd Qu.	Max.
1.00	27.56	37.89	38.11	51.67	90.00

Table 2. Values of average vehicle intensities over the 12 tons of weight proceed in range for Brno to Prague.

Min.	1st Qu.	Med.	Avrg.	3rd Qu.	Max.
1.00	17.56	26.78	26.87	36.33	64.00

The final intensity I_{dt}, our model calculates with, is an average value, which consists from both average intensities for each of the particular direction at one toll gate in the same time and same day type. The model does not distinguish the separate emission load for each traffic direction, but calculates it as overall emission load in defined toll gate point. This is because we do not count with directional separate intensities[1].

The number of vehicles cannot be exactly identified from the input data file. Cars pass through several toll gates in 15 minutes time periods, but details about this passing are not included. An estimate of the number of vehicles is thus determined as relative proportion to the maximum intensity over the period of 15 minutes.

For the day type "Friday", the maximum intensity was recorded in the period between 14:00–21:00 at all the gates in the entire length of each traffic direction. Similarly, final estimates of average intensities were prepared for each day type.

The percentage ratio of the number of vehicles in the case of drive limitation between 14:00–21:00 for day type "Friday" is defined as the portion of recorded intensity during the referred time and the total day intensity of vehicles in the all day time period (00:00–24:00).

Intensity Data Analysis. As we can see in Figure 2, all-day traffic is visible from the graph. At night hours traffic is almost constant and during the day time increases. Significant grow is especially visible in the vicinity of Prague (0–20th km) and Brno (180th–196th km). Depicted 250 km segment includes all 34 toll gates.

Behind the exit to Ceske Budejovice city (21th km) we notice a significant intensity fall. In following segments, the traffic load is more or less constant.

Near town Humpolec (90th km) it slightly increases again. On the exit to D2 highway behind Brno city (196th km), in the direction to town Vyskov city (230th km), traffic significantly decreases (especially during night hours). Moreover, towards to Vyskov, traffic decreases to minimum (even during the day).

In the graph, in direction to Prague, there is depicted all-day traffic again. At night hours it is smaller than in the opposite direction. Traffic in this direction (and for this day) is approximately 5% lower than in the direction to Brno, respectively to the whole ratio of highway network traffic.

Intensities across the highway are very similar to the opposite direction. Again, there is perceptible connection from Ceske Budejovice city (21th km) and the intensity outflow from town Humpolec (90th km).

The significant increase in traffic intensity is visible in the vicinity of Brno city, again, especially after the D2 highway connection (196th km). Other connections are visible in the 210th km (traffic from Uherske Hradiste town) and then very strong intensity increase at the 230th km (traffic from Vyskov).

[1]It could be very difficult to determine which pollution element is from which side of the highway

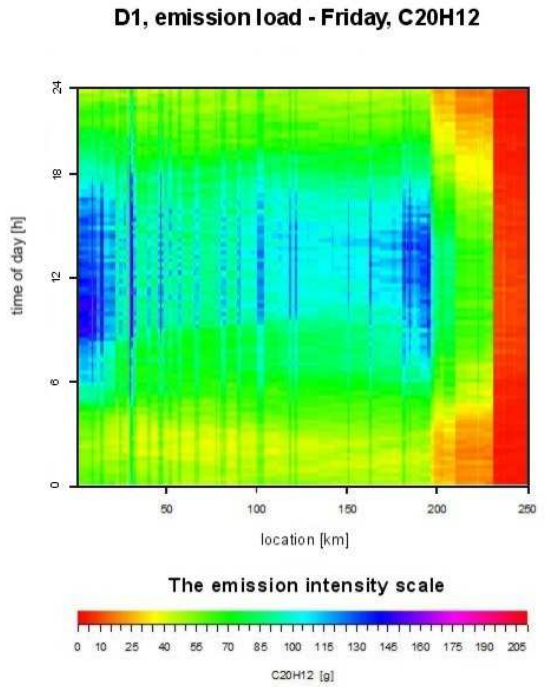


Fig. 4. Example of the output chart of the emission load estimate for C20H12 factor.

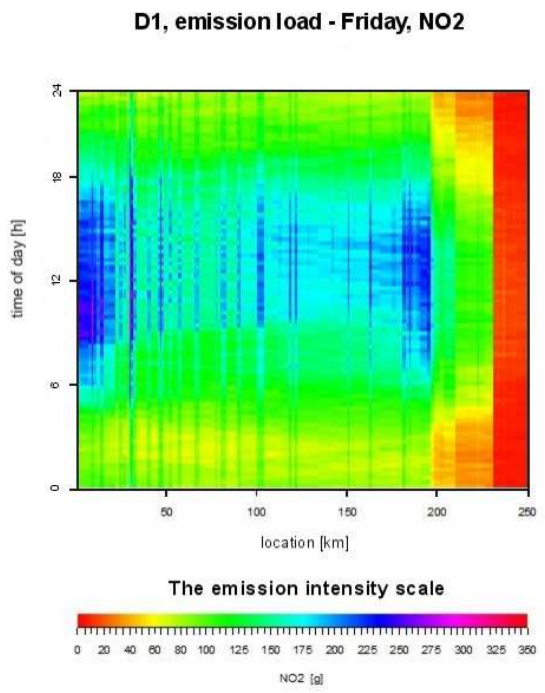


Fig. 5. Example of the output chart of the emission load estimate for NO2 factor.

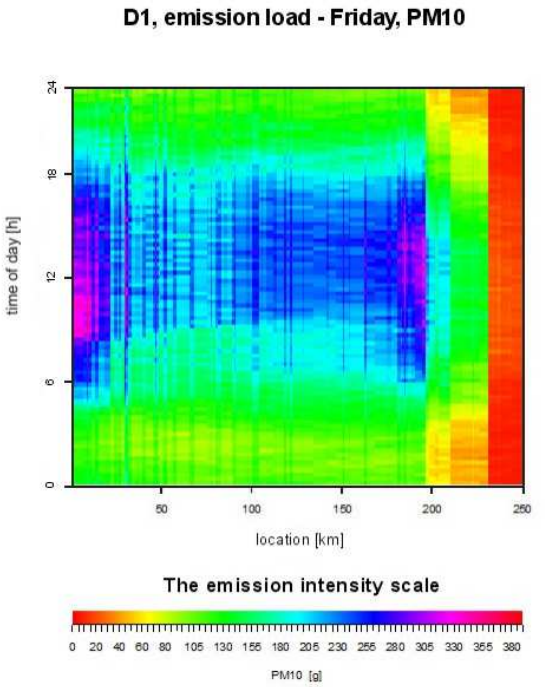


Fig. 6. Example of the output chart of the emission load estimate for PM10 factor.

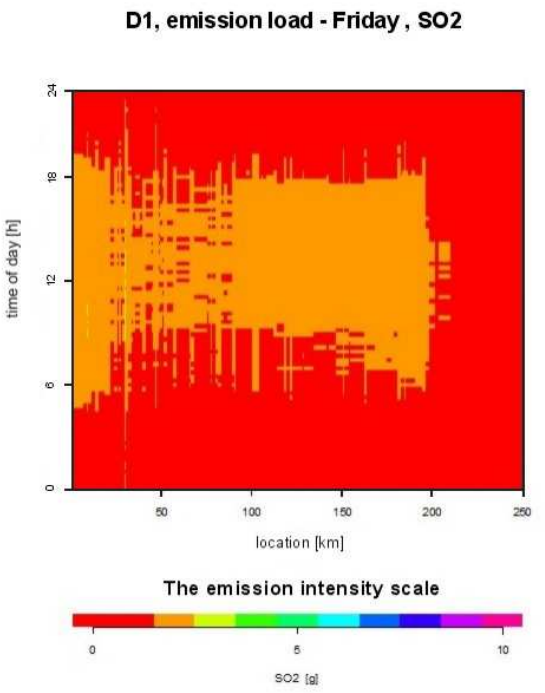


Fig. 7. Example of the output chart of the emission load estimate for SO2 factor.

Output Data. The output of the calculations is given as the average emission load of the monitored road segment, in [g/km] (see examples in Figures 4–7). The output values are presented in a form of graph.

Model Results

Figures 4–7 show examples of the graphic output. In these outputs, special charts for each of the emission factor type were created. Similar charts have been prepared for each day type.

Peaks of the heavy truck traffic are apparent. They can be easily recognized in increasing concentration of the appropriate emission factor. Alternating strips (more or less emission factor concentration) along the road distance intervals display influence of the road inclination change.

Conclusion

The output of the present model was used to calibrate fuzzy models predicting the effect of toll gate systems.

Moreover, the model will become a founding stone of more complex models in the future. Such models may, for instance, help to distinguish the relative impacts of road traffic and other sources of pollution on the environment.

Finding, formulating and implementation of more parameters to the model could lead in more accuracy results. Further developing of presented model should be able to give better resolution in the future, especially in emission factors from mobile sources, mainly by implementing the weather module.

The emission factors may be involved in the road toll level. The aim of such regulation method should be seen in proportionally distributed traffic in relation to its impact on the surrounding. There could be various types of toll reductions, depending on the different road classes usage.

For example, toll fee could be higher for the first, second and third road class in opposition to the highway network. This solution would effectively move the passing traffic from the close attached settled areas to the highway network. Thus the solution would overall calm down and partially clear settled localities.

For these purposes it is necessary to find and further develop methods how to in suitable way measure emission factors of mobile sources in surrounding of other road types, than on highway network (used here). It is also necessary find another and more accurate ways, how emission factors measure in general.

References

[1] *Cicero-Fernandez P., Long J. R.* Grades and Other Load Effects on On-Road Emissions: An On-Board Analyzer Study // San Diego, California, Fifth Annual On-Road Vehicle Emissions Workshop, 1995.

[2] *Gammariello R., Carlock M.* Development of Hourly Vehicle Activity for Estimating Vehicle Emissions // San Diego, California, Seventh CRC On-Road Vehicle Emissions Workshop, April 1997.

[3] *Hrubes P., Kazmarova H., Keder J., Helmut T., Potuznikova D.* The study Run limitation of selected trucks on weekends — an impact and benefits analysis. // Prague, Czech Technical University, 2008 — Research report LSS 337/08, part III., 33, Pp. 20–32.

[4] *Hrubes P., Vlckova V., Carsky J., Kumpost P., Brabec M., Pelikan E.* The study Weekend trip limitations of selected heavy trucks – an impact and benefits analysis // Prague, Czech Technical University, 2008 — Research report LSS 337/08, part I., 129, Pp. 5–84.

[5] *Svitek M., Starek T., Hrubes P., Kantor S., Derbek P.* Intelligent Transport Systems (ITS) and Their Impact on Sustainable Development // Prague, Czech Technical University, 2008 — Annual Report, Vol. 26, (ID OC194) Pp. 15–18.

[6] *Zito P., Chen H., Bell M.* Predicting real-Time Roadside CO and NO2 Concentrations Using Neural Networks // IEEE Transaction on Intelligent Transportation Systems 2008 — Vol. 9, No. 3.

[7] Coefficients for the emission factors. `http://www.env.cz/AIS/web-pub.nsf/$pid/MZPMSF437BOZ`.

Service quality management in transport telematics solutions*

Zelinka T., Svitek M., Bouchner P.
svitek@fd.cvut.cz
Faculty of Transportation Sciences, Czech Technical University, Prague, Czech Republic

Intelligent Transportation Systems solutions require wireless telecommunications data access solutions provided on selectable level of well defined service quality. Selection of private solutions guarantee reasonable service quality levels, but within limited areas only. Available mobile wireless services can offer acceptable service coverage, but with no guarantee of preferable data quality level. Authors describe mobile solution reaching reasonable quality level which is based on the dynamical selection of the best possible service from the set of accessible alternatives.

Introduction

ITS (Intelligent Transport systems) are associated with serious expectations and getting ITS applications in the real practice is understood as essential potential to significantly faster resolve many transport challenges. Research is concentrated on the promotion of ITS architecture in real ITS practice and using it for solving the different ITS optimization tasks. In this paper main afford is oriented to the communications key support of the ITS architecture.

Telematic requirements communications solution

The first step in addressing the ITS architecture requirements is the analysis and establishment of performance parameters in designed telematics applications, in co-operation with the end-users or with organizations like Railways Authority, Road and Motorways Directorates, Airport and Air-transport Authorities, Government etc. The methodology for the definition and measurement of following individual system parameters is being developed in frame of the ITS architecture and it is described e. g. in [1, 2]:

- *Accuracy* — defined as quality of congruence between measured and defined value of parameter / process / function.
- *Reliability* — defined as system ability to execute required functions without interrupting in defined time interval on certain probability level.
- *Availability* — defined as system ability to execute required functions after system / process initiation according to certain procedure till time limit on certain probability level.
- *Continuity* — defined as system ability to execute required functions/processes without unplanned interrupting (outage) on certain probability level.
- *Integrity* — defined as system ability to diagnose overrun predefined parameters and inform user/ operator about this fact after required time interval on certain probability level.
- *Safety* — defined as system ability to ensure, that in the case of fault will not come to system damage, material losses or human life losses.

The completed decomposition of system parameters enables application of the follow-up analysis of telematic chains according to the various criteria (optimization of the information transfer between a mobile unit and processing centre, maximum use of the existing information and telecommunication infrastructure, etc.). It is obvious that quantification of requirements on relevant telecommunication solutions within telematic chains plays one of key roles in this process.

Data transmission capacity can act due to possible high density of moving objects and limited wireless capacities critical system requirements, which can be resolved either by application of broadcasting regime of data distribution or by selective individually reduced frequency of positional data distribution.

Following communications performance indicators quantify communications service quality (see [3, 4]):

- *Availability* — (Service Activation Time, Mean Time to Restore (MTTR), Mean Time Between Failure (MTBF) and VC availability),
- *Delay* is an accumulative parameter and it is effected by either interfaces rates, frame size or load/congestion of all in line active nodes (switches),
- *Packet/Frames* Loss (as a tool which not direct mean network failure),
- *Security.*

Performance indicators applied for such applications must be transformable into telematic performance indicators structure and vice versa. Indicators transformability simplifies system synthesis. Additive impact of the communications performance indicators vector $\overrightarrow{tci}$ on the vector of telematics performance indicators $\Delta\overrightarrow{tmi}$ can be expressed as $\Delta\overrightarrow{tmi} = TM \cdot \overrightarrow{tci}$, where TM represents transformation matrix. It is valid, however, only under condition that probability levels of all studied phenomena are on the same level and all performance indicators are expressed exclusively by parameters with the same physical dimension — typically in time or in time convertible variable (see e. g. [4]). Transformation matrix construction

This work was supported by Ministry of Industry and Business and Ministry of Transport of the Czech Republic via grants MPO 2A-2TP1/108, MPO 2A-2TP1/105, MPO 2A-1TP1/138, CAMNA MD 802/210/112.

is dependent on the detailed communication solution and its integration into telematic system. Probability of each phenomena appearance in context of other processes is not deeply evaluated in the introductory period, when specific structure of transformation matrix is identified. In [4] are presented details of proposed iterative method. Method is designed as broadly as possible with clear aim to be applied in the widest possible range of telematic application. This method can be also successfully used for identification of decision processes criteria, i. e. tolerance range of each performance indicator. Such information represents necessary (but not sufficient) condition to let processes decide which access technology is in defined time period the best possible alternative.

Multi-path access solution structure

Family of standards ISO TC204, WG16.1 CALM (Communications Air-interface for Long and Medium range) represents concept of identification of the best available wireless access solution in given time and area. Process of the alternative wireless access solution substitution is understood as the second generation of the handover principle known namely from the cellular mobile systems. Each handover process is predestinated by set of performance indicators range identified for decision processes implemented in the control unit. CALM standards have implemented Policy-Based Management (PBM) approach. This concept has been traditionally and successfully applied in the IP based terrestrial networks. Such approach, however, has got remarkable limits for wireless networks discussed later in this paper.

Details of CALM architecture are described e. g. in [5] and [6]. Handover in CALM is implemented on the suitable layer. Alternative approach based on standard IEEE 802.21 — see e. g. [7] — expects integration of the L2 switching into handover process, as well, even though with this system approach we identified remarkable advantages against the "CALM" alternative.

Authors' solution is based on L3 routing principles and this approach and it can be categorized as "intelligent routing". Such approach offers advantage of the exclusively SW based implementation and no special HW requirements on OBU (On Board Unit) installed in the vehicle.

Second generation handover action can be determined by evaluation of the performance indicators set like Bit Error Rate (BER), Packets Lost Ratio (PLR) or packet Round Trip Delay (RTD) as well as remarkable number of other e. g. "radio" parameters with different level of influence on the final decision. Decision to switch to the alternative path is so complex issue with high number of input parameters. Number of inputs can be limited, if significant parameters are identified, and all other known parameters can be accepted as insignificant. Such afford to identify the key performance indicators has been basis for our specific studies of all available telecommunications technologies used in the transport telematics.

DOTEK

Authors firstly accepted PBM approach based on "extended deterministic decisions" where also "radio parameters" are included. This approach is combined with L3 routing in project of the communication module for transport telematics — DOTEK. "DOTEK approach" ensures the best wireless access solution selection from the set of available wireless services and it is based on system parameters benchmarking derived from the telematic application requirements recorded in form of set parameters range into the "decision" table.

The main objective of the DOTEK project was motivated by the "CALM ideas", however, principal difference if compared with "CALM approach" is in implementation of the "intelligent" routing principles replacing L2 switching used in case of CALM solution. DOTEK project was focused mainly on the following areas:

- Analysis and selection of available wireless services applicable for different transport telematics services.
- Design of comprehensive management including decision algorithm for selection of optimal data transfer technology.
- Provisioning of the continuous monitoring (possible well due to L3 routing based approach) and evaluation of given services quality necessary for the correct decision to select appropriate service.
- "Extended table based" processing of the decision in order to ensure proper operation of telematics applications.

An important part of communication module is to monitor current system parameters and communication technologies in order to assess their current situation and decide about their suitability for use according to the specific requirements of telematic applications. Telecommunication technologies are described by system parameters like: availability, latency, signal to noise ratio (SNR), packet/frames loss, bit error ratio (BER) etc.

For the pilot implementation basic three monitored system parameters were adopted just: signal to noise ratio, packet latency and packet loss. In case of further implementation it will be possible to include other system parameters if relevant impact is identified.

DOTEK solution was successfully tested this "extended PBM approach." System successfully passed test scenarios for verification its basic functionalities. Results of measured times needed for the sec-

Table 1. Results of test scenario — time of handover.

Test no.	Average handover time [ms]
1	208
2	137
3	41
4	108
5	362

ond generation handover are presented in the Table 1 (see e. g. [10]).

Project DOTEK was successfully finalized and obtained results were integrated into existing on-board unit (OBU) tested with telematic applications EFC, fleet management, e-Call and navigation. Results, i. e. developed software has got modular structure, and, therefore it can be integrated into other compatible systems. Correctly integrated modules can provide relevant management of applied communication solutions. Presented pilot implementation is applicable in wide range of transport telematics solutions.

Alternative approach to decision process

Below presented approach can be understood as the "conservative" approach based on Bayes statistics with well known limits given by CPU capacity consuming complex mathematical implementations. Authors are driven by fact that applied services are operated as wireless access solutions with parameters not being available in the terrestrial solutions (like SNR). Complex mathematical solution can require remarkable capacity of the applied CPU. However, dynamically increasing CPU power of communication microchip systems diminishes requirement on reduction of CPU capacity needs and complex statistical mathematical approach does no mean any technical problem for more demanding.

Following paragraphs describe our approach to the decision processes. Proposed methodology is based on following principles — see [9]:

Set of measured and filtered parameters is extended by deterministic parameters like identification communicated with tall collection, economical parameter, corporate policy etc. All together it is presented as vector $\mathbf{x}$.

Based on time lines of vector $\mathbf{x}$ it is feasible to classify the best possible technology selection. Applied classification (see e.g. [8] or [9]) algorithm is trained using time lines of training vectors $\mathbf{x}$ extended by assignment to the relevant class, i. e. selected path.

Success of classification is obviously related to the size and quality of the training data lines.

Let us define the classification problem [7] as an allocation of the feature vector $\mathbf{x} \in R^D$ to one of the C mutually exclusive classes knowing that the class of $\mathbf{x}$ takes the value in $\langle \Omega = \{\omega_1, \ldots, \omega_C\} \rangle$ with probabilities $P(\omega_1), \ldots, P(\omega_C)$, and $\mathbf{x}$ is a realization of a random vector characterized by a conditional probability density function $p(\mathbf{x} \,|\, \omega)$, $\omega \in \Omega$. This allocation means the selection of best fitted telecommunication technology based on knowledge of $\mathbf{x}$ vector.

A non-parametric estimate of the ω-th class conditional density provided by the kernel method is:

$$\hat{f}(\mathbf{x} \,|\, \omega) = \frac{1}{N_\omega h_\omega^D} \sum_{i=1}^{N_\omega} K\left(\frac{\mathbf{x} - x_i^\omega}{h_\omega}\right), \tag{1}$$

where $K(\cdot)$ is a kernel function that integrates to one, h_ω is a smoothing parameter for ω-th class, N_ω stands for sample count in class ω and $\mathbf{X}_1^\omega, \ldots, \mathbf{X}_{N_\omega}^\omega$ is the independent training data. The density estimate defined by (1) is also called the Parzen window density estimate with the window function $K(\cdot)$.

Choice of a particular window function is not as important as the proper selection of smoothing parameter. For our case we use the Laplace kernel defined by the following Laplace density function:

$$f_L(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{2\omega} \exp\left(-\frac{|x - \mu|}{\sigma}\right), \tag{2}$$

where $x \in R, \mu \in R, \sigma \in (0, \infty)$.

The product kernel is used with a vector of smoothing parameters $\mathbf{h}_\omega = (h_{1\omega}, \ldots\ldots, h_{D\omega})$ for each class ω. The product kernel density estimate with Laplace kernel is then defined as

$$\hat{f}(\mathbf{x} \,|\, \omega) = \frac{1}{N_\omega} \sum_{i=1}^{N_\omega} \prod_{j=1}^{D} \frac{1}{2h_{\omega,j}} \exp\left(-\frac{|x_j - x_{i,j}^\omega|}{h_{\omega,j}}\right). \tag{3}$$

Smoothing vectors $\mathbf{h}_\omega$ are optimized by a pseudo-likelihood cross-validation method using the Expectation-Maximization (EM) algorithm — see [8].

To rank the features according to their discriminative power the standard between-to within-class variance ratio is employed. This method is based on the assumption that individual features have Gaussian distributions. The feature vector $\mathbf{x} \in R^D$ takes value to one of C mutually exclusive classes $\Omega = \{\omega_1, \ldots, \omega_C\}$. The probabilistic measure of two classes separability for the feature d (d-th component of feature vector) $Q_{d,i,j}(d, \omega_i, \omega_j)$ is defined as

$$Q_{d,i,j}(d, \omega_i, \omega_j) = \frac{\eta \cdot (\sigma_i + \sigma_j)}{\mu_i - \mu_j}, \tag{4}$$

where i and j are classes and symbol $\eta = 3.0$ denotes the real constant specifying the interval taken into account (probability that observation of normally distributed random variable falls in $\left[\mu - 3.0\sigma,\ \mu + 3.0\sigma\right]$ is 0.998). The smaller is the value of the measure $Q_{d,i,j}(d, \omega_i, \omega_j)$, the better is separation of the inspected classes made by the feature d. For $Q_{d,i,j}(d, \omega_i, \omega_j) < 1$ both classes are completely separable. The measure is similar to the widely used Fisher criterion.

For multi-class problems, the two-class contributions are accumulated to get a C-class separability measure $Q(d)$ for the feature d :

$$Q(d) = \sum_{i=1}^{C} \sum_{i=1, i \neq j}^{C} Q_{d,i,j}(d, i, j). \quad (5)$$

All the features in the training data are then sorted according to their $Q(d)$ measures. The function $Q(d)$ is similar to the significance of the of d-th component of the measured feature vector. The subset of n first features is selected as an output of this individual feature selection method. The drawback of the method is the assumption of unimodality and the fact that just linear separability is taken into account. On the other hand, the individual feature selection method based on the between-to within-class variance ratio is very fast.

Presented classification approach is effectively applicable for relevant decision processes used to select the best possible alternative access from the set of available paths. Presented method allows solutions implementations with limited information flows between layer 2HL and layers 1HL and CL. Presented solution is, however, open for any future changes in information resources.

It is important to stress that optimized number of the representative key performance indicators based on detailed study of communications solutions (see [10]) can lead to the significant reduction of required CPU capacity (see DOTEK).

Conclusion

Complexity of the telematic services, wide area coverage, several classes of services with different system requirements lead to multi-path wireless access solution designed as seamless switched combination of more independent access solutions of the same or alternative technology.

Most of published implementations are based on Policy-based Management (PBM). This concept has been traditionally applied in the IP based networking with remarkable success. Implemented "extended PBN based" decision processes are presented as well as obtained parameters describing such system behavior.

Authors' final goal is, however, solution based on Bayes statistics approach. Set of measured parameters can be so flexibly extended by deterministic parameters like economical parameter, corporate policy etc. Based on self trained classification processes it is feasible to classify the best possible selection i. e. assigning data vector to one of set of classes. Classification algorithm is trained using time line of training data vectors extended by correct assignment to the relevant class, i. e. selected path.

Optimized number of the representative key performance indicators can reduce requirement on CPU capacity. That is the reason why detailed study of each applied telecommunications technology has been accomplished in our laboratory to identify specific representative key performance indicators for each technology potentially applied in the system.

References

[1] *Svitek M.* Architecture of ITS Systems and Services in the Czech Republic // International Conference Smart Moving, 2005 — Birmingham, England.

[2] *Svitek M., Zelinka T.* Telecommunications solutions for ITS // Towards Common Engineering & Technology for Land, Maritime, air and Space Transportation (ITCT), 2006 — Paris, France.

[3] *Svitek M., Zelinka T.* Communication solution for GPS based airport service vehicles navigation // EATIS'97 ACM-DL Proceedings, 2007, — Faro, Portugal.

[4] *Zelinka T., Svitek M.* Communication solution for Vehicles Navigation on the Airport territory // Proceedings of the 2007 IEEE Intelligent Vehicle Symposium, Istanbul, Turkey, 2007. — Pp. 528–534.

[5] *Williams B.* CALM handbook V1.0. // Document ISO TC204 WG.16.1 CALM, 2004.

[6] *Zelinka T., Svitek M.* CALM - Telecommunication Environment for Transport Telematics // Technology & Prosperity, V. XI, special edition (11/06), 2006.

[7] *Oliva A. at al.* IEEE 802.21 enabled mobile terminals for optimized WLAN/3G handovers // ACM SIGMOBILE Mobile Computing and Communications, 2007. — Vol. 11, Is. 2. — Pp. 29–40.

[8] *Zelinka T., Svitek M.* Decision processes in telematic multi-path communications access systems // International Journal of Communications, North Atlantic University Network NOUN, 2007, Iss. 2. — V. 1. — Pp. 11–16.

[9] *Svitek M., Zelinka T.* Decision processes in Communications Multi-path Access Systems applied within ITS // Transactions on Transport Science, MTCR. — Praha, Czech Republic, 2008. — No. 1, Pp. 3–12.

[10] *Zelinka T., Svitek M., Srotyr M., Vosatka M.* Adaptive multi-path Telecommunications Solutions for ITS // Proceedings of, 14-th World Multi-Conference on Systemics, Cybernetics and Informatics, Orlando, FL, USA, 2010. — Vol. I, Pp. 89–94.

Выбор оптимального по точности состава бортовых оптических измерений в задаче оценивания расстояния до цели*

Бахшиян Б. Ц., Назиров Р. Р., Федяев К. С.
bbakhshiyan@gmail.com, rnazirov@cosmos.ru, ksfedyaev@gmail.com
Москва, ИКИ РАН

Рассматривается задача оценивания расстояния от движущегося управляемого объекта, снабженного системой оптического наблюдения, до некоторой цели и определения их взаимного пространственного положения. Описан способ выбора среди множества наблюдаемых на цели точек (реперных знаков) такого их набора, который позволяет оценить заданный контролируемый параметр (расстояние до цели) с максимальной точностью. Приводится пример расчетов.

Finding the accuracy optimal structure of the onboard observations in a problem of estimating the distance to the target*

Bakhshiyan B. Ts., Nazirov R. R., Fedyaev K. S.
Space Research Institute RAS, Moscow, Russia

A problem of estimating the distance between a moving guided object and a fixed target is discussed. It is assumed that the distance can be estimated by optical observations from the moving object. A method of finding the optimal set of the observed points (bench marks) on the target is presented. This method allows one to estimate the given controlled parameter (the distance to the target) with the best accuracy. An example of founding the optimal set of bench marks is considered.

Введение

Задача оценивания контролируемых параметров управляемого объекта и, в частности, расстояния от этого объекта до некоторой заданной цели является одной из задач теории управления движением. Такая задача возникает, например, при разработке алгоритмов управления процессом автоматической стыковки космических аппаратов. При этом требуется оценить расстояние от некоторой точки, связанной с движущимся объектом управления (например, центром некоторой системы координат, связанной с этим объектом) до некоторой точки на цели, с которой осуществляется стыковка. Как правило, на цели имеется несколько специальных маркеров (реперных знаков), позволяющих определить не только расстояние до цели, но и пространственную ориентацию объекта управления относительно данной цели. В связи с этим нами была рассмотрена задача нахождения такого расположения реперных знаков, которое позволило бы оценить расстояние до объекта с максимальной точностью. Решению этой задачи и посвящена настоящая работа.

Модель оценивания

Будем считать, что на движущемся объекте управления имеется оптический датчик, позволяющий получить в системе координат этого объекта координаты центров всех точечных объектов, попавших в поле зрения датчика.

Будем рассматривать следующие системы координат (см. рис. 1):

1) неподвижная $OXYZ$, связанная с посадочной плоскостью;
2) подвижная $O'xyz$, связанная с оптическим датчиком.

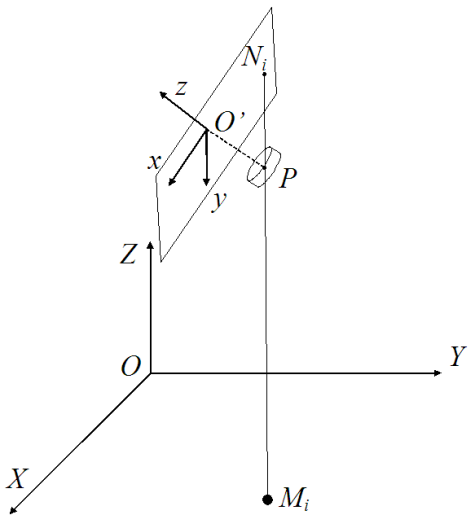


Рис. 1. Используемые системы координат.

Пусть $\boldsymbol{A}$ — матрица поворота, переводящего неподвижную систему координат $OXYZ$ в систему координат с центром O и осями, параллельными

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 09-08-00202 и федерального агентства по образованию министерства образования и науки РФ, проект 2.1.1/2904 «Перспективные методы в современных задачах управления, оценивания и классификации» аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)».

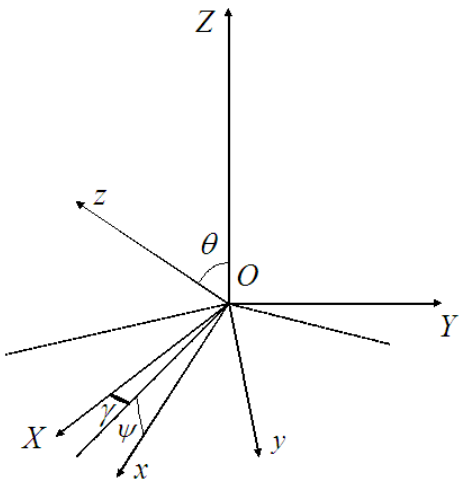


Рис. 2. Используемые угловые характеристики.

осям $O'x$, $O'y$, $O'z$ подвижной системы координат (система Кенига, [3]). Эта матрица является функцией трех углов, связывающих неподвижную и подвижную системы координат: угла курса γ, угла дифферента ψ и угла крена θ (см. рис. 2).

Обозначим через

$$\boldsymbol{r}(P) = \boldsymbol{f} \doteq (f_x, f_y, f_z)^{\intercal}$$

радиус-вектор оптического центра P в подвижной системе координат, компоненты f_x, f_y, f_z которого будем считать оцениваемыми параметрами.

Обозначим также через M_i точку на цели, соответствующую i-му реперному знаку, а через N_i образ этой точки на матрице оптического датчика. Тогда точка M_i имеет в неподвижной системе координаты $\boldsymbol{R}(M_i) = \big(X(M_i),\, Y(M_i),\, 0\big)^{\intercal}$, а точка N_i в подвижной системе имеет координаты $\boldsymbol{r}(N_i) = \big(x(N_i),\, y(N_i),\, 0\big)^{\intercal}$. Модель измерений имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} &\tilde{x}(N_i) = x(N_i) + \xi_{ix};\\ &\tilde{y}(N_i) = y(N_i) + \xi_{iy}, \quad i = 1, \ldots, s, \end{aligned} \tag{1}$$

где $\tilde{x}(N_i)$, $\tilde{y}(N_i)$ — измеренные значения соответствующих координат точек N_i, ξ_{ix}, ξ_{iy} — соответствующие ошибки измерений, s — число реперных знаков. По этим измерениям требуется найти координаты точек M_i в подвижной системе координат, т. е. величины

$$\boldsymbol{r}(M_i) = \big(x(M_i), y(M_i), z(M_i)\big)^{\intercal}.$$

Координаты точек M_i в подвижной и неподвижной системах связаны соотношением

$$\boldsymbol{r}(M_i) = \boldsymbol{r}(O) + \boldsymbol{A}^{\intercal} \cdot \boldsymbol{R}(M_i). \tag{2}$$

Здесь $\boldsymbol{r}(M_i)$ — искомые величины, $\boldsymbol{R}(M_i)$ известны, вектор $\boldsymbol{r}(O)$ находится из условия

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{r}(O) + \boldsymbol{A}^{\intercal} \cdot \boldsymbol{R}(P),$$

где $\boldsymbol{R}(P)$ — координаты оптического центра в неподвижной системе.

Перепишем соотношение (2) в виде

$$\boldsymbol{r}(M_i) = \boldsymbol{f} - \boldsymbol{A}^{\intercal} \cdot \big(\boldsymbol{R}(P) - \boldsymbol{R}(M_i)\big). \tag{3}$$

Из (3) следует, что для нахождения оценок векторов $\boldsymbol{r}(M_i)$ достаточно по известным измерениям в модели (1) определить 9-мерный вектор неизвестных параметров

$$\boldsymbol{q} = \big(\boldsymbol{R}(P), \gamma, \psi, \theta, \boldsymbol{f}\big)^{\intercal}.$$

Модель измерений (1) выражается через $2s$ координат $x(N_i)$, $y(N_i)$ точек N_i. Преобразуем модель (1) к виду, в котором измеряемые параметры будут функцией только вектора $\boldsymbol{q}$. Для этого запишем очевидные соотношения, которые отражают условие принадлежности одной прямой точек N_i, P, M_i:

$$\frac{\overrightarrow{PN_i}}{|PN_i|} = \frac{\overrightarrow{M_iP}}{|M_iP|}, \; i = 1, \ldots, s. \tag{4}$$

Здесь $\overrightarrow{PN_i} = \boldsymbol{r}(N_i) - \boldsymbol{r}(P)$, $\overrightarrow{M_iP} = \boldsymbol{R}(P) - \boldsymbol{R}(M_i)$. Равенства (4) в подвижной системе координат перепишутся в виде

$$\frac{\boldsymbol{r}(N_i) - \boldsymbol{r}(P)}{\|\boldsymbol{r}(N_i) - \boldsymbol{r}(P)\|} = \boldsymbol{A}^{\intercal} \frac{\boldsymbol{R}(P) - \boldsymbol{R}(M_i)}{\|\boldsymbol{R}(P) - \boldsymbol{R}(M_i)\|}. \tag{5}$$

Обозначим через $\boldsymbol{g}_i = (g_{ix}, g_{iy}, g_{iz})^{\intercal}$ правую часть формулы (5). Этот вектор является функцией неизвестных параметров $\boldsymbol{R}(P)$, γ, ψ, θ. Учтем, что

$$\boldsymbol{r}(N_i) - \boldsymbol{r}(P) = \big(x(N_i) - f_x,\, y(N_i) - f_y,\, -f_z\big)^{\intercal}.$$

Тогда, выражая из третьего уравнения в (5) величину $\|\boldsymbol{r}(N_i) - \boldsymbol{r}(P)\| = -f_z/g_{iz}$ и подставляя это выражение в первые два уравнения, запишем окончательно модель (1) в искомом виде

$$\begin{aligned} &\tilde{x}(N_i) = f_x - \frac{g_{ix}}{g_{iz}} f_z + \xi_{ix},\\ &\tilde{y}(N_i) = f_y - \frac{g_{iy}}{g_{iz}} f_z + \xi_{iy}, \quad i = 1, \ldots, s. \end{aligned} \tag{6}$$

Здесь каждая измеряемая функция зависит только от вектора $\boldsymbol{q}$ неизвестных параметров и известного вектора $\boldsymbol{R}(M_i)$.

Кроме измерений (6) будем также рассматривать в качестве измерений известные заранее априорные значения q_j^0 компонент вектора $\boldsymbol{q}$. Тогда модель (6) дополнится уравнениями

$$q_j^0 = q_j + \xi_{qj}, \; j = 1, \ldots, 9. \tag{7}$$

МНК и оценка точности

Пусть σ_{ix}, σ_{iy}, σ_{qj} — стандартные отклонения ошибок ξ_{ix}, ξ_{iy}, ξ_{qj}. Оценка $\hat{\boldsymbol{q}}$ вектора $\boldsymbol{q}$ во взве-

шенном методе наименьших квадратов (МНК) находится из условия

$$\hat{\boldsymbol{q}} = \arg\min_{\boldsymbol{q}} \left\{ \sum_{i=1}^{s} \left[\left(\frac{\tilde{x}(N_i) - f_x + \frac{g_{ix}}{g_{iz}} f_z}{\sigma_{ix}} \right)^2 + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \left(\frac{\tilde{y}(N_i) - f_y + \frac{g_{iy}}{g_{iz}} f_z}{\sigma_{iy}} \right)^2 \right] + \sum_{j=1}^{9} \left(\frac{q_j^0 - q_j}{\sigma_{qj}} \right)^2 \right\} \quad (8)$$

и является решением системы нормальных уравнений

$$\sum_{i=1}^{s} \left[\left(\frac{\tilde{x}(N_i) - f_x + \frac{g_{ix}}{g_{iz}} f_z}{\sigma_{ix}} \right) \boldsymbol{H}_{1i}(\boldsymbol{q}) + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{\tilde{y}(N_i) - f_y + \frac{g_{iy}}{g_{iz}} f_z}{\sigma_{iy}} \right) \boldsymbol{H}_{2i}(\boldsymbol{q}) \right] +$$

$$+ \left(\frac{q_1^0 - q_1}{\sigma_{q_1}^2}, \ldots, \frac{q_9^0 - q_9}{\sigma_{q_9}^2} \right)^{\intercal} = 0,$$

где

$$\boldsymbol{H}_{1i}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\sigma_{ix}} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} \left(f_x - \frac{g_{ix}}{g_{iz}} f_z \right)^{\intercal};$$

$$\boldsymbol{H}_{2i}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\sigma_{iy}} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} \left(f_y - \frac{g_{iy}}{g_{iz}} f_z \right)^{\intercal}.$$

Оценка (8) обычно вычисляется методом последовательных приближений путем линеаризации модели измерений около оценки, полученной на текущем приближении. На первом приближении линеаризованная модель измерений (6)–(7) имеет вид

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{H}^{\intercal}(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}^{\boldsymbol{0}}) + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (9)$$

Здесь $\boldsymbol{d}$ — $(2s+9)$-вектор, составленный из $2s$ нормированно-центрированных измерений и девяти нулевых значений центрированных априорных данных:

$$\frac{\tilde{x}(N_i) - x(N_i)\,|_{\,q=q^0}}{\sigma_{ix}};$$

$$\frac{\tilde{y}(N_i) - y(N_i)\,|_{\,q=q^0}}{\sigma_{iy}}, \quad i = 1, \ldots, s;$$

$$\frac{q_j^0 - q_j^0}{\sigma_j} = 0, \quad j = 1, \ldots, 9,$$

$\boldsymbol{\varepsilon}$ – соответствующий вектор нормированных ошибок измерений, $\boldsymbol{H}$ — матрица размера $9 \times (2s+9)$, составленная из столбцов $\boldsymbol{H}_{1i}(\boldsymbol{q}^0)$, $\boldsymbol{H}_{2i}(\boldsymbol{q}^0)$, $i = 1, \ldots, s$, и столбцов $\boldsymbol{e}_j/\sigma_{qj}$, $j = 1, \ldots, 9$, соответствующих уравнениям (7). Здесь $\boldsymbol{e}_j$ – столбец с единственной ненулевой компонентой 1 на j-м месте, который соответствует априорному измерению q_j^0).

На втором приближении вместо вектора $\boldsymbol{q}^0$ используется оценка МНК $\hat{\boldsymbol{q}}$ вектора $\boldsymbol{q}$ в линейной модели (9), найденная по формуле

$$\hat{\boldsymbol{q}} = \boldsymbol{q}^0 + \boldsymbol{Y}^{\intercal}\boldsymbol{d}, \quad (10)$$

где матрица $\boldsymbol{Y}$ определяется по формуле

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{H}^{\intercal}(\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}^{\intercal})^{-1}.$$

Выберем на цели некоторую точку M и рассмотрим в качестве контролируемого параметра величину

$$\rho = \sqrt{x(M)^2 + y(M)^2 + z(M)^2}$$

— расстояние от начала подвижной системы координат до точки M. Для линеаризованной модели МНК-оценка параметра ρ является линейной функцией вектора измерений и определяется из соотношения

$$\hat{\rho} - \rho(\boldsymbol{q}^0) = \boldsymbol{X}^{\intercal}\boldsymbol{d},$$

где

$$\boldsymbol{X}^{\intercal} \doteq \boldsymbol{b}^{\intercal}\boldsymbol{Y}^{\intercal}, \quad \boldsymbol{b}^{\intercal} \doteq \frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{q}}.$$

В качестве характеристики точности оценивания этого параметра примем дисперсию его оценки

$$D\hat{\rho} = \boldsymbol{X}^{\intercal}\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{d}}\boldsymbol{X}, \quad (11)$$

где $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{d}}$ — корреляционная матрица вектора $\boldsymbol{d}$. Традиционно величина (11) вычисляется в предположении о попарной некоррелированности измерений (6)–(7) (матрица $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{d}}$ — единичная). Однако такое предположение часто бывает слишком оптимистическим и может приводить к завышенной оценке точности. Рассмотрим другой предельный случай (самый пессимистический), когда допускается произвольная корреляция между компонентами вектора $\boldsymbol{d}$, т. е. недиагональные элементы матрицы $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{d}}$ ограничены лишь условиями

$$|K_{pq}| \leqslant 1.$$

Найдем для этого случая максимальное (гарантированное) значение дисперсии оценки контролируемого параметра ρ в (11). Оно равно

$$\mathrm{Dguar} \doteq \max_{\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{d}}} D\hat{\rho} = \left(\sum_{i=1}^{2s+9} |X_i| \right)^2. \quad (12)$$

Нахождение оптимальной стратегии оценивания

Рассмотрим задачу нахождения минимальной гарантированной дисперсии оценки параметра ρ. Будем искать минимальные дисперсии (12) на множестве всех линейных несмещенных алгоритмов

оценивания, т. е. для всех векторов $\boldsymbol{X}$, удовлетворяющих условию несмещенности

$$\boldsymbol{HX} = \boldsymbol{b}.$$

Это множество алгоритмов содержит все алгоритмы МНК вида (10) с разными составами измерений [1].

Оптимизационная задача записывается в виде [2]

$$\mathrm{D}^*_{\mathrm{guar}} \doteq \min\left\{\mathrm{Dguar} \,:\, \boldsymbol{HX} = \boldsymbol{b}\right\}. \qquad (13)$$

Решение задачи (13), полученное методом линейного программирования, имеет следующий вид [2]. Оптимальный вектор $\boldsymbol{X}^*$ содержит не более 9 ненулевых переменных. Пусть $X^*_1, \ldots, X^*_r$ — ненулевые компоненты вектора $\boldsymbol{X^*}$, соответствующие оптическим измерениям, а компоненты $X^*_{r+1}, \ldots, X^*_9$ содержат все ненулевые компоненты, соответствующие априорным данным (нумерация условна). Тогда оптимальная стратегия оценивания для этого случая состоит в том, что $9 - r$ соответствующих априорных данных полагаются равными своим априорным значениям, а остальные r компонент вектора $\boldsymbol{q}$ определяются однозначно по r оптическим измерениям.

Результаты расчетов

Рассмотрим случай, когда цель представляет собой круг радиусом 50 см., в центре которого располагается один из реперных знаков, а остальные реперные знаки могут выбираться произвольно на границе круга. Рассмотрим задачу определения расстояния до центра круга и нахождения такого расположения реперных знаков, которое позволит оценить это расстояние с наибольшей точностью. Пусть имеется априорная информация о том, что оптический центр P датчика находится на расстоянии 200 см от центра круга, плоскость матрицы оптического датчика наклонена по дифференту к плоскости мишени под углом $\psi = \pi/12$ радиан, оптическая ось датчика была направлена в центр круга. Значения стандартных отклонений ошибок измерений принимались равными 0,5 пиксела (3 мкм), для априорных данных стандартные отклонения для координат оптического центра полагались равными 1 см, по угловым величинам — 0,1 градуса, по фокусному расстоянию — 10 мкм.

Для этого случая было выбрано 100 точек, расположенных равномерно на границе круга, и на этом множестве реперных знаков решалась задача (13). Полученный результат показывает, что оптимальным является использование только четырех реперных знаков, выделенных на рис. 3, по которым определяются координаты оптического центра $\boldsymbol{R(P)}$ и значение угла курса γ. Остальные компоненты вектора $\boldsymbol{q}$ в соответствии с полученным решением следует положить равным своим априорным значениям.

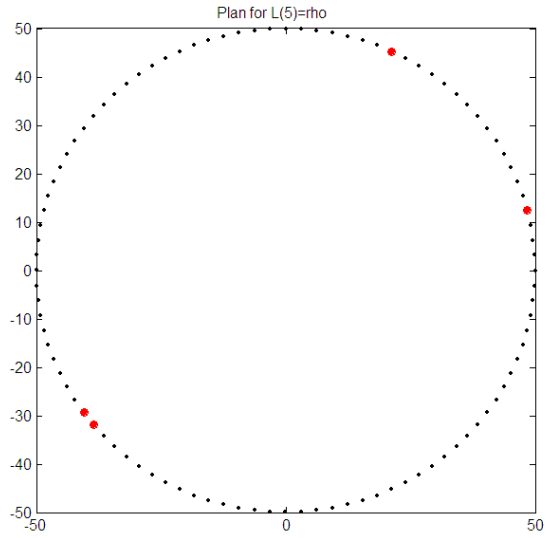


Рис. 3. Оптимальное расположение реперных знаков для оценивания расстояния до цели.

Литература

[1] *Рао С. Р.* Линейные статистические методыи их применение. — М: Наука, 1968.

[2] *Бахшиян Б. Ц., Назиров Р. Р., Эльясберг П. Е.* Определение и коррекция движения. — М: Наука, 1980.

[3] *Журавлев В. Ф.* Основы теоретической механики. — М: Наука. Физматлит, 1997.

О задачах синтеза метрик, связанных с поиском прецедентов для оценки промышленных рисков*

Помазков А. А., Черноплёков А. Н.
Jta2007@yandex.ru
Москва, ООО «Газпром ПХГ»

В докладе представлена новая для применения метрических методов анализа данных предметная область — задача поиска прецедентов для оценки промышленных рисков. Показано, что в связи с этой прикладной задачей возникает специальная проблема коррекции метрики, заданной на конечном множестве объектов. Обсуждаются подходы к решению данной проблемы.

Distance optimization for case-based industrial risk assessment*

Pomazkov A. A., Chernoplekov A. N.
Gazprom UGS, Moscow

In this paper the search of relevant cases for industrial risk assessment is considered as a new application field for distance based data mining techniques. A particular problem of metric correction

Оценка рисков возникновения аварий на этапе проектирования в значительной степени основана на анализе прецедентов. На практике в настоящее время использование прецедентов фактически сводится к использованию опыта экспертов. При этом у ведущих мировых компаний, в частности, в нефтегазовой промышленности, имеются корпоративные базы данных, содержащие описания интересующих нас прецедентов. Для использования этих прецедентов при проектировании новых объектов необходимы эффективные процедуры отбора в базах наиболее адекватных (близких, похожих) прецедентов. Решение этой задачи может быть основано на поиске метрики на признаковых описаниях проектных решений, для которой в качестве функционала качества используется близость к расстояниям между признаковыми описаниями «жизненного цикла» промышленных объектов.

Анализ риска аварий на опасных производственных объектах (далее — анализ риска) является составной частью управления промышленной безопасностью. Анализ риска заключается в систематическом использовании всей доступной информации для идентификации опасностей и оценки риска возможных нежелательных событий [1–5]. Результаты анализа риска используются при обосновании технических решений по обеспечению безопасности, экономическом анализе безопасности по критериям «стоимость — безопасность — выгода» с учетом принципа «разумной достаточности», страховании и при других процедурах, связанных с анализом безопасности.

Основные задачи анализа риска на стадии проектирования заключаются в представлении лицам, принимающим решения:

- сведений о наиболее опасных, «слабых» местах с точки зрения безопасности;
- обоснованных рекомендаций по уменьшению риска.

На этапе размещения (обоснования инвестиций или проведении предпроектных работ) или проектирования опасного производственного объекта целью анализа риска, как правило, является:

- выявление опасностей и априорная количественная оценка риска с учетом воздействия поражающих факторов аварии на персонал, население, имущество и окружающую природную среду;
- обеспечение учета результатов при анализе приемлемости предложенных решений и выборе оптимальных вариантов размещения опасного производственного объекта, применяемых технических устройств, зданий и сооружений опасного производственного объекта с учетом особенностей окружающей местности, расположения иных объектов и экономической эффективности;
- обеспечение информацией для разработки инструкций, технологического регламента и планов ликвидации (локализации) аварийных ситуаций на опасном производственном объекте;
- оценка альтернативных предложений по размещению опасного производственного объекта или техническим решениям.

Для обеспечения качества анализа риска используют знание закономерностей возникновения и развития аварий на опасных производственных объектах. Если существуют результаты анализа риска для подобного опасного производственного объекта или аналогичных технических устройств, применяемых на опасном производственном объекте, то их можно применять в качестве исходной информации. Однако при этом следует показать,

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 10-07-00428-а, № 08-07-00401-а.

что объекты и процессы подобны, а имеющиеся отличия не будут вносить значительных изменений в результаты анализа.

Одним из этапов анализа риска является оценка риска, состоящая в определении количественной или качественной меры идентифицированных на предшествующих этапах рисков.

Основные задачи этапа оценки риска связаны с:

— определением частот возникновения инициирующих и всех нежелательных событий;
— оценкой последствий возникновения нежелательных событий;
— обобщением оценок риска.

Для определения частоты нежелательных событий в настоящее время используют:

— статистические данные по аварийности и надежности технологической системы, соответствующие специфике опасного производственного объекта или виду деятельности;
— логические методы анализа «деревьев событий», «деревьев отказов», имитационные модели возникновения аварий в человеко-машинной системе;
— экспертные оценки путем учета мнения специалистов в данной области.

Обеспечение необходимой информацией является важным условием проведения оценки риска. Вследствие недостатка статистических данных на практике используют экспертные оценки и методы ранжирования риска, основанные на упрощенных методах количественного анализа риска. В этих подходах рассматриваемые события или элементы обычно разбиваются по величине вероятности, тяжести последствий и риска на несколько групп (или категорий, рангов), например, с высоким, промежуточным, низким или незначительным уровнем риска.

Вообще, при проведении количественной оценки риска формирование базы данных по исследуемому объекту/установке/сооружению и региону его размещения является ответственной задачей, ошибки в решении которой могут повлечь принятие неверных решений. На различных фазах жизненного цикла объекта/установки/сооружения для количественной оценки риска доступны различные по своей полноте данные. На этапе проектирования основными источниками исходных данных для количественной оценки риска являются проектные документы, а на этапе эксплуатации — реальные данные об отказах в работе оборудования.

Для целей анализа риска все многообразие возможных причин возникновения аварий разделяется на ограниченный набор стандартизованных моделей инициирования аварий (так называемых «инициирующих событий»), характеризуемых детерминированными физическими параметрами (диаметром эквивалентного отверстия, типом истечения, видом продукта) и вероятностным параметром (условная вероятность и частота реализации данного события).

Все оборудование, используемое на объекте, можно разделить на ограниченное число типов (категорий), в соответствие с используемыми в них физико-химическими процессами и конструктивными особенностями, например, резервуары, трубопроводы, насосы, компрессоры и т. д. В пределах одного типа (категории) оборудование характеризуется одинаковым набором возможных моделей инициирования аварий. По сути, типы (категории) оборудования являются моделями реального оборудования опасных производственных объектов, используемыми для анализа риска. Для каждого типа (категории) технологического оборудования устанавливаются свои специфические инициирующие события и модели разрушения оборудования (потери герметичности) под воздействием поражающих факторов аварии (ударных и тепловых воздействиях и осколочного поражения). Средние ожидаемые частоты инициирующих событий вычисляются в процессе анализа статистических данных о предыдущих инцидентах с аналогичным оборудованием. Подробные статистические базы данных ведутся как отечественными, так и зарубежными ведущими организациями в области промышленной безопасности, а также крупными нефтегазовыми операторами, например, базы данных ITOPF, WOAD, OREDA, E&P Forum, JIP. Интегрированной базы не существует, а доступ к корпоративным базам крупных компаний затруднен, что делает информационное обеспечение экспертов при принятии ими решений неполным. Но даже при наличии крупной базы, поиск адекватных прецедентов затруднен отсутствием эффективной системы отбора, учитывающей совокупность специфических факторов при эксплуатации каждого объекта или его элементов.

Авторам неизвестно о применении метрик с целью поиска адекватных прецедентов для решения задач по управлению промышленной безопасностью на стадии проектирования технологических комплексов.

Создание эффективной системы поиска прецедентов в доступном систематизированном массиве данных о статической (проектирование) и динамической (эксплуатация) фазах жизненного цикла объекта планируется осуществить за счет использования адекватных метрик. Решение задачи поиска прецедентов обеспечит экспертов, осуществляющих оценку промышленных рисков на стадии проектирования производственных объектов, наиболее полной информацией об особенностях протекания динамической фазы подобных объектов, что повысит качество принимаемых ими решений.

Поиск прецедентов будет осуществляться по первой группе признаков существующих объектов — параметрам проектных решений, второй группой признаков объектов является динамика жизненного цикла, отраженная в эксплуатационной документации существующих технологических комплексов и их элементов. Создание адекватной метрики для второй группы признаков существующих объектов будет являться основой для корректирующих действий по отношению к метрике для первой группы признаков. Необходимо отметить, что вторая группа признаков существующих технологических комплексов является прецедентами для прогнозирования промышленных рисков на стадии эксплуатации проектируемого объекта. Для решения задачи согласования метрик, заданных на дизъюнктных подмножествах признаковых описаний, предлагается подход, основанный на минимизации функционала оценки нарушений монотонности в соотношениях расстояний анализируемых метрик.

Задача согласующей коррекции метрик в рамках алгебраического подход [8–12] к проблеме синтеза корректных алгоритмов рассматривается также как задача с явными теоретико-множественными ограничениями [6, 7, 13], в качестве которых выступает, в частности, аксиома треугольника. При этом используются также результаты о корректирующих операциях на метриках, полученные в работах [14–16].

Авторы выражают благодарность чл.-корр. РАН Рудакову К. В. за научную консультацию.

Литература

[1] *Шавкин С. В., Черноплеков А. Н., Гостева А. В., Монахов Р. Е., Ляпин А. А.* Расчет частоты аварийной разгерметизации для количественного анализа риска современных магистральных газопроводов // Приложение к журналу «Безопасность жизнедеятельности». — 2009. — № 3. — С. 1–24.

[2] *Кловач Е. В., Черноплеков А. Н., Шалина А. Е., Яковлев Д. Ю.* Возможности применения интегрированных систем обеспечения безопасности работ на опасных производственных объектах нефтегазовой отрасли // Безопасность труда в промышленности. — 2009. — № 3. — С. 54–60.

[3] *Черноплеков А. Н., Ляпин А. А., Шавкин С. В., Монахов Р. Е.* Использование консервативного подхода при анализе безопасности береговых трубопроводов // УКАНГ, 2007. — № 3. — С. 40–46.

[4] *Черноплеков А. Н., Бурдаков Н. И.* Принцип «разумной достаточности» // Экономика и ТЭК сегодня. — 2007. — № 3. — С. 63–65.

[5] *Ляпин А. А., Черноплеков А. Н.* Методика оценки риска на этапе Технико-Экономического обоснования строительства объектов нефтегазовой отрасли // Тезисы докладов. 5-я научно-техническая конференция Актуальные проблемы состояния и развития нефтегазового комплекса России, 23–24 января 2003г.

[6] *Воронцов К. В., Рудаков К. В., Чехович Ю. В.* О теоретико-множественных ограничениях и комбинаторной теории переобучения для алгоритмов классификации // Труды МФТИ. — Долгопрудный, 2009. — Т. 1, № 4. — С. 148–163.

[7] *Рудаков К. В., Чехович Ю. В.* Критерии полноты семейств корректирующих операций и моделей алгоритмических операторов для задач классификации с теоретико-множественными ограничениями // Доклады Академии наук. — 2004. — Т. 395, № 6. — С. 749–750.

[8] *Журавлев Ю. И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Проблемы кибернетики. — 1978. — Т. 33. — С. 5–68.

[9] *Рудаков К. В.* Полнота и универсальные ограничения в проблеме коррекции эвристических алгоритмов классификации // Кибернетика, 1987. — № 3.

[10] *Рудаков К. В.* Симметрические и функциональные ограничения в проблеме коррекции эвристических алгоритмов классификации // Кибернетика, 1987. — № 4.

[11] *Рудаков К. В.* О применении универсальных ограничений при исследовании алгоритмов классификации // Кибернетика, 1988. — № 1.

[12] *Рудаков К. В., Журавлев Ю. И.* Об алгебраической коррекции процедур обработки (преобразования) информации // Проблемы прикладной математики и информатики. — М.: Наука, 1987.

[13] *Рудаков К. В., Чехович Ю. В.* Критерии полноты для задач классификации с теоретико-множественными ограничениями // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2005. — Т. 45, № 2. — С. 344–353.

[14] *Майсурадзе А. И.* Гомогенные и ранговые базисы в пространствах метрических конфигураций // ЖВМиМФ. — 2006. — Т. 46, № 2. — С. 344–361.

[15] *Майсурадзе А. И.* О свойствах оптимальных точечных конфигураций для одного семейства функционалов сравнения метрических конфигураций // ЖВМиМФ. — 2005. — Т. 45, № 9. — С. 1741–1748.

[16] *Майсурадзе А. И.* Об оптимальных разложениях конечных метрических конфигураций в задачах распознавания образов // ЖВМиМФ. — 2004. — Т. 44, № 9. — С. 1697–1707.

Об идентификации имитационных моделей сложных социально-технических систем по агрегированным данным*

Чехович Ю. В.
chehovich@forecsys.ru
Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН

Работа посвящена изучению проблем синтеза и идентификации имитационных моделей сложных систем определенного класса. В работе ставится проблема идентификации таких моделей по заведомо недостаточным данным — содержащим ошибки, имеющим высокую степень агрегации — и предлагаются пути решения этой проблемы.

About identification of simulation models of difficult socially-technical systems by means of the aggregated data*

Chekhovich Y. V.
Dorodnicyn Computing Centre of RAS

The paper is devoted to studying of problems of synthesis and identification of simulation models of systems of a certain class. The problem of identification of such models by means of obviously insufficient data i. e. containing the errors, having high degree of aggregation is described. Ways of the decision of this problem are offered.

Предметом исследования настоящей работы являются методы изучения определенного класса систем, которые принято называть сложными социально-техническими системами. Такие системы имеют ряд особенностей, которые в значительной степени определяют методы их исследования. Во-первых, такие системы характеризуются большим количеством объектов и большим количеством связей между объектами. Другим важным качеством является наличие целесообразности в действиях объектов, составляющих систему, т.е. объекты действуют для достижения некоторого конечного состояния или ряда промежуточных состояний. Следует отметить, что объекты при этом не обязательно действуют рационально. Еще одним важным свойством сложных социально-технических систем является часто демонстрируемое контринтуитивное поведение системы, Это проявляется и в отсутствии «простых универсальных» законов, определяющих взаимосвязи параметров системы. Необходимо также отметить слабую предсказуемость поведения исследуемых систем — знание свойств каждого конкретного объекта и знание поведения системы в истории не позволяет точно предсказать поведение системы в будущем.

Следует отметить, что к системам с описанными свойствами в первую очередь можно отнести системы, функционирование которых основано на регулярном принятии субъективных решений объектами системы. Чаще всего к таким системам относят различного рода торговые системы — биржи, рынки аукционы; транспортные системы — автомобильные, авиационные, железнодорожные; системы ведения боевых действий, электоральные системы и т. д.

Одним из самых популярных инструментов исследования сложных систем являются методы имитационного моделирования. При этом часто имитационные модели сложных систем строятся на основе использования простых законов, описывающих действия объектов системы [2, 3]. В то же время, при синтезе, идентификации и верификации имитационных моделей часто возникает ряд проблем, связанных со сложностью верификации моделей — она, как правило, производится по косвенным признакам; с поиском оптимальных решений, как функции внешних параметров системы, ввиду низкой скорости расчета моделей, а также большим количеством внешних параметров, одновременная оптимизация по которым приводит к комбинаторному взрыву; с низкой интерпретируемостью полученных результатов.

Ранее были исследованы вопросы синтеза имитационных моделей сложных систем, который основаны на подходе к синтезу обучаемых алгоритмов решения задач классификации с теоретико-множественными ограничениями [4–6].

Предложенный подход основывался на предположении наличия у каждого объекта системы возможности получать и анализировать данные о некоторой своей «окрестности» в рамках системы, а также возможности выбора принимаемого решения из относительно бедного множества возможных решений. Предполагалось, что объект принимает решения, основываясь на анализе локальной ситуации. При этом различные субъекты

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №08-07-00304) и гранта Президента РФ для поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук МК-7954.2010.9.

в одной и той же ситуации (или близких ситуациях) могут принимать различные решения. Считалось, что субъекты, принимающие одинаковые решения в сходных ситуациях принадлежат одному классу объектов.

С помощью таких теоретико-множественных ограничений в модель вводились определенного рода «разумные» ограничения на множества принимаемых решений. Прецедентами при такой постановке оказывались пары вида ⟨описание локальной ситуации, тип принятого решения⟩. Далее, следуя парадигме алгебраического подхода, производились обучение модели, в результате чего синтезировался алгоритм, который классифицирует субъекты по типам их действий в различных ситуациях в соответствии с существующими прецедентами.

Работа с указанной предметной областью показала, что одной из серьезных проблем при синтезе и идентификации имитационных моделей сложных систем является наличие и доступность для исследователей адекватных исходных данных. Зачастую получение и предварительная обработка таких данных является не менее или даже более трудоемкой задачей, чем разработка модели. При этом достаточно часто относительно доступными оказываются данные высокой степени агрегации, которые пригодны для определенной верификации модели, но малопригодны для идентификации параметров модели. Типичным примером описанного положения вещей является такая сложная система, как автомобильная транспортная система крупного города. В то время, как для идентификации модели требуются так называемые трековые данные, которые отражают положение транспортных средств на проезжей части в каждый момент времени и позволяют рассчитывать скорости и ускорения транспортных средств, в наличии имеются статистические данные, например о средних скоростях движения транспортных средств на участках транспортной сети. Например, такого рода данные представляет пользователям проект Яндекс.Пробки [1].

Фактически речь идет о замене необходимых исторических данных о поведении каждого объекта системы существующими историческими данными ансамблевого типа. Возникает задача идентификации имитационных моделей сложных социально-технических систем с использованием исключительно таких «грубых» данных. Важно, что при использовании таких данных необходимо восстанавливать не только характеристики объектов, но и фактический состав (распределение типов) этих объектов. Смежной и не менее важной задачей является также верификация идентифицированной модели с помощью ансамблевых данных.

В докладе рассматриваются методы идентификации и верификации имитационных моделей с помощью специальных процедур качельного типа.

Литература

[1] `http://maps.yandex.ru/` Проект Яндекс.Пробки.

[2] *Иванов Г. Е., Рудаков К. В., Чехович Ю. В.* Алгебраический подход к имитационному моделированию транспортных потоков // Некоторые проблемы фундаментальной и прикладной математики, Москва, 2007 — С. 97–100. ISBN 5-7417-0106-X

[3] *Романов М. Ю., Рудева А. В., Громов С. А., Ефимов А. Н., Лексин В. А., Яминов Р. И., Чехович Ю. В.* Система имитационного моделирования транспортной сети аэропорта AirForS // Искусственный интеллект. — 2006. — № 2. — С. 432–435.

[4] *Чехович Ю. В.* Классификационный подход к имитационному моделированию транспортных потоков // Интеллектуализация обработки информации (ИОИ-2008): Тезисы докл. — Симферополь: КНЦ НАН Украины, 2008. — С. 239–240.

[5] *Чехович Ю. В.* О классификационном подходе к имитационному моделированию транспортных потоков // Математические методы распознавания образов: 14-я Всероссийская конференция. Владимирская обл., г. Суздаль, 21–26 сентября 2009 г.: Сборник докладов. — М.: МАКС Пресс, 2009. — С. 618–620.

[6] *Чехович Ю. В.* Применение алгебраического подхода к имитационному моделированию сложных социально-технических систем // Сборник докладов третьей всероссийской научно-практической конференции «Имитационное моделирование. Теория и практика», Санкт-Петербург, 2007. — Том I. — С. 249–252.

Содержание

Фундаментальные основы интеллектуального анализа данных 5

Vetrov D., Osokin A.
Submodular decomposition approach for inference in Markov random fields 5

Абрамов В. И., Середин О. С., Сулимова В. В., Моттль В. В.
Эквивалентность потенциальных функций и линейных пространств представления объектов произвольной природы 9

Бериков В. Б., Лбов Г. С.
Оценивание качества таксономических деревьев решений и кластерного ансамбля 13

Борисова И. А.
Выявление зависимости между величиной FRiS-функции и вероятностью ошибочного распознавания 17

Ботов П. В.
Точные оценки вероятности переобучения для несимметричных многомерных семейств алгоритмов 20

Воронцов К. В., Решетняк И. М.
Точные комбинаторные оценки обобщающей способности онлайнового обучения 24

Гуров С. И.
Информационная модель алгоритма классификации и оценка его надёжности 28

Донской В. И.
Применение pVCD метода оценивания емкости классов алгоритмов эмпирического обобщения . . 32

Дорофеев Н. Ю.
Критерии полноты моделей алгоритмов нечёткой разметки точечных конфигураций 35

Дьяконов А. Г.
Оценки степени корректных полиномиальных замыканий подмоделей модели ABO 39

Дюкова Е. В., Сотнезов Р. М.
О сложности перечисления элементарных классификаторов в логических процедурах распознавания 43

Дюкова Е. В., Нефёдов В. Ю.
Об асимптотически эффективном поиске конъюнктивных закономерностей 47

Ежова Е. О., Красоткина О. В., Моттль В. В.
Непрерывная коррекция информационного критерия Акаике для регуляризованного оценивания сверхбольшого числа параметров регрессионных моделей данных с неизвестной дисперсией наблюдения 51

Журавлёв Ю. И.
О логических алгоритмах распознавания 55

Ивахненко А. А.
О вероятности переобучения пороговых конъюнкций 57

Карпович П. А., Дьяконов А. Г.
k-сингулярные системы, приложения в алгебраическом подходе к распознаванию 61

Майсурадзе А. И.
Об одном метрическом аналоге метода главных компонент 65

Матросов В. Л., Шибзухов З. М.
Об одном классе корректных алгоритмов вычисления ΣΠ-оценок 68

Махина Г. А.
О сведении задачи распознавания к монотонному случаю 71

Неделько В. М.
О максимальном смещении эмпирического риска как оценки вероятности ошибочной классификации 73

Полежаева Е. А.
Инкрементные методы в коллаборативной фильтрации 77
Рудаков К. В.
О задачах классификации значений признаков в задачах классификации 81
Толстихин И. О.
Вероятность переобучения плотных и разреженных семейств алгоритмов 83
Фрей А. И.
Вероятность переобучения плотных и разреженных многомерных сеток алгоритмов 87
Хачай М. Ю.
Топологический подход к выводу условий равномерной по классу событий сходимости частот к вероятностям 91
Чернов В. М.
О «линеаризации» задачи разделения классов в пространствах с неархимедовыми метриками . . . 95

Методы и модели интеллектуального анализа данных 99
Borisov A. E, Tuv E. V
Active learning with tree ensembles 99
Kropotov D., Vetrov D., Wolf L., Hassner T.
Bayesian logistic regression for classification of tabular data 103
Strijov V. V., Letmathe P.
Integral indicators based on data and rank-scale expert estimations 107
Бауман Е. В., Дорофеюк А. А., Москаленко Н. Е.
Методы оптимальной группировки параметров долевого типа 111
Бауман Е. В., Гольдовская М. Д., Кулькова Г. В.
Методы размытой упорядоченной классификации в задаче оценки альтернатив 115
Генрихов И. Е., Дюкова Е. В.
Построение и исследование распознающих процедур на основе полных решающих деревьев 117
Двоенко С. Д., Панферов А. В.
Распознавание и визуализация множества элементов, представленных взаимными близостями . . 121
Дорофеюк А. А., Бауман Е. В., Покровская И. В.
Методы структуризации многомерных динамических объектов 125
Дорофеюк А. А., Киселёва Н. Е., Чернявский А. Л.
Оптимальные алгоритмы автоматической классификации сложно организованных данных 129
Дюбанов В. В., Загоруйко Н. Г.
Обучение алгоритма FRiS-Pro прогнозированию характеристик, измеренных в абсолютной шкале 133
Загоруйко Н. Г.
Когнитивный анализ данных, основанный на использовании FRiS-функции 137
Игнатов Д. И., Каминская А. Ю., Кузнецов С. О., Магизов Р. А.
Метод бикластеризации на основе объектных и признаковых замыканий 140
Копенков В. Н., Сергеев В. В., Тимбай Е. И.
Метод иерархической аппроксимации как решение задачи многомерных косвенных измерений . . 144
Красоткина О. В., Моттль В. В., Турков П. А.
Байесовский подход к задаче обучения распознаванию образов в нестационарной генеральной совокупности 148
Крымова Е. А., Стрижов В. В.
Выбор регрессионных моделей с анализом мультиколлинеарности 153
Лисица А. В., Воронцов К. В., Ивахненко А. А., Инякин А. С., Синцова В. В.
Системы тестирования алгоритмов машинного обучения: MLcomp, TunedIt и Полигон 157
Мандель А. С.
Экспертно-статистическая обработка информации и метод аналогов как средство искусственного интеллекта 161

Мандель А. С., Дорофеюк Ю. А.
Экспертно-классификационная и экспертно-статистическая обработка информации и принятие решений . . . 165
Маслакова С. Н., Середин О. С.
Учёт отношения соседства между признаками при их отборе в задаче обучения распознаванию образов . . . 169
Покровская И. В., Бауман Е. В., Дорофеюк Ю. А.
Методы структуризации качественных данных в задаче агрегирования больших экспериментальных графов . . . 173
Панов М. Е., Татарчук А. И., Моттль В. В.
Метод нейтральной точки для компенсации пропусков в обучающей совокупности при обучении распознаванию образов по методу опорных векторов . . . 176
Скипор К. С., Стрижов В. В.
Метод наименьших углов для логистической регрессии . . . 180
Филипенков Н. В.
О плавно меняющихся алгоритмах классификации . . . 184
Чернявский А. Л., Дорофеюк А. А., Дорофеюк Ю. А.
Экспертно-структурные методы построения хорошо интерпретируемых классификаций . . . 188
Янковская А. Е., Китлер С. В.
Интеллектуальный анализ k-значных данных . . . 192
Янковская А. Е.
Анализ данных и знаний на основе конвергенции нескольких наук и научных направлений . . . 196

Моделирование и метамоделирование систем и процессов . . . 200
Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V.
About hybrid algorithm for tuning of parameters in approximation based on linear expansions in parametric functions . . . 200
Burnaev E. V., Belyaev M. G., Prihodko P. V.
Dimension reduction for function approximation based on piecewise-linear regression . . . 204
Kuleshov A. P., Bernstein A. V., Burnaev E. V.
Metamodelling with using domain-specific knowledge . . . 208
Kuleshov A. P., Bernstein A. V.
Predictive metamodeling and data analysis . . . 212
Vetrov D. E.
Software support of metamodelling . . . 216
Бурнаев Е. В., Бернштейн А. В.
Методы консолидации разноточных данных . . . 220
Горшенин А. К., Королёв В. Ю., Шоргин С. Я.
CPC-методы как методы интеллектуального анализа данных при исследовании реальных хаотических процессов . . . 224
Кондраков И. А., Шананин А. А.
Анализ фондовых и валютных рынков с помощью обобщенного непараметрического метода . . . 228
Чернова С. С., Ветров Д. Е., Маркевич С. В.
Генерация многомерных данных, лежащих на многообразии меньшей размерности . . . 232

Оптимизация и сложность вычислений . . . 236
Береснев В. Л.
Алгоритм локального поиска для задачи конкурентного размещения предприятий . . . 236
Гимади Э. Х.
Алгоритмы с оценками качества решения некоторых задач выбора подмножества векторов в евклидовом пространстве . . . 240

Голиков А. И., Евтушенко Ю. Г., Посыпкин М. А.
Параллельные методы решения задач оптимизации большой размерности 244
Долгушев А. В., Кельманов А. В.
О сложности одной задачи кластерного анализа 248
Ерзин А. И., Шамардин Ю. В.
Одна задача синтеза оптимального остовного дерева 251
Забудский Г. Г., Лагздин А. Ю.
Эффективные алгоритмы решения специальных случаев квадратичной задачи о назначениях на сетях 255
Заозерская Л. А., Колоколов А. А., Гофман Н. Г.
Оценки среднего числа итераций для некоторых алгоритмов решения задачи о рюкзаке 258
Кельманов А. В.
NP-полнота некоторых задач анализа данных 262
Кельманов А. В., Пяткин А. В.
NP-полнота некоторых задач выбора подмножества векторов 266
Кельманов А. В., Михайлова Л. В., Хамидуллин С. А.
Об одной задаче обнаружения и идентификации векторных наборов в последовательности 270
Колоколов А. А., Леванова Т. В., Федоренко А. С.
Исследование математических моделей и декомпозиционных алгоритмов для решения двухстадийной задачи размещения 274
Кочетов Ю. А.
Метаэвристики для одной задачи сжатия информации 278
Кочетова Н. А.
Трудные тестовые примеры для задач кластеризации и размещения производства 282
Плясунов А. В.
Гибридные методы решения сложных комбинаторных задач, использующие декомпозицию 286
Посыпкин М. А.
Об оценках вычислительной сложности метода ветвей и границ в задаче о сумме подмножеств . . 290
Файзуллин Р. Т., Дулькейт В. И., Хныкин И. Г.
О линейных соотношениях для задачи 3-ВЫПОЛНИМОСТЬ 293

Дискретный анализ, теория кодирования, теория информации 297
Коротков Д. Ю., Сметанин А. Ю.
Определение минимальных фрагментов, различающих слова над конечным алфавитом 297
Лукьянова Е. А., Дереза А. В.
Об одном процессе верификации алгоритмических схем 299

Обработка, анализ и распознавание изображений 303
Glumov N. I., Mitekin V. A.
A new RST-invariant robust image watermarking method based on blockwise host image processing . 303
Glumov N. I., Mitekin V. A.
A new algorithm for image authentication and information hiding using pseudo-quantization 307
Koltsov P. P.
Contour's blur determination method for the digital images 311
Lange M., Ganebnykh S.
Fast recognition of 2D objects represented by the trees of primitives 313
Murashov D. M.
A two-step procedure for automated registration of visible and x-ray images of fine art paintings 317
Броневич А. Г., Гончаров А. В.
Функции расстояния для классификации знаковых представлений изображений 321

Гашников М. В., Мясников В. В.
Обнаружение информативных фрагментов в задаче оценки качества изображений 325
Гуревич И. Б., Яшина В. В.
Пространство формализации изображений 329
Дегтярёв Н. А., Середин О. С.
Геометрический подход к комбинированию алгоритмов поиска лиц на изображениях 334
Дышкант Н. Ф.
Сравнение поверхностей заданных на неструктурированных сетках и сетках разной плотности . . 339
Ермаков А. С., Середин О. С.
Вероятностная потенциальная функция для распознавания изображений 343
Жарких А. А., Бычкова С. М.
Вероятности распознавания направления переноса в одной модели случайного движения точки на плоскости 346
Жукова К. В., Рейер И. А.
Структурный анализ формы объекта с помощью скелетного ядра 350
Каркищенко А. Н., Гончаров А. В.
Геометрия знакового представления изображений и её приложение к исследованию устойчивости к шумам 355
Каркищенко А. Н., Мнухин В. Б.
Классификация изображений периодических структур на основе непрерывного преобразования симметрии 359
Митекин В. А., Федосеев В. А.
Метод обнаружения водяных знаков, основанных на визуально незаметном искажении текстур . 363
Кий К. И.
Модифицированный метод геометризованных гистограмм и его применение 367
Котик С. В.
Скелетизация полутоновых изображений отпечатков пальцев для задачи идентификации личности371
Кузнецов А. В., Глумов Н. И.
Обнаружение локальных искусственных изменений на крупноразмерных изображениях 375
Лепский А. Е.
Оптимальный выбор параметров в упрощенной схеме детектора Харриса 379
Мехедов И. С.
Многолистная многоугольная фигура и ее скелет 383
Стреляев В. С., Копылов А. В., Визильтер Ю. В.
Восстановление формы трехмерного объекта по двум плоским проекциям с использованием стековых морфологических деревьев 387
Ташлинский А. Г.
Оптимизация псевдоградиента целевой функции при оценивании межкадровых геометрических деформаций изображений 391
Федотов Н. Г., Мокшанина Д. А.
Триплетные признаки изображений со сложной полутоновой текстурой 395
Хорева А. М., Ташлинский А. Г.
Оптимизация плана взятия отсчетов при оценивании межкадровых геометрических деформаций изображений 399

Обработка и анализ сигналов 403
Kropotov D., Laptev D., Osokin A., Vetrov D.
Signal segmentation with label frequency constraints using dual decomposition approach for hidden Markov models 403
Демин Д. С., Чуличков А. И.
Сравнение формы нескольких сигналов, порожденных нелинейным монотонным преобразованием из неизвестного прообраза, и оценивание параметров их формы 407

Копылов А. В., Красоткина О. В., Моттль В. В., Приймак А. Ю.
Алгоритм обработки сигналов на основе параметрического динамического программирования . . 410

Приложения в области наук о Земле 414
Mandrikova O. V., Geppener V. V., Goreva T. S., Klionskiy D. M.
Multicomponent simulation and forecasting of a complex natural signal 414
Абламейко С. В., Крючков А. Н., Апарин Г. П., Сотикова Е. Е.
Комплекс программно-информационных средств оперативного дешифрирования космических изображений 418
Абламейко С. В., Крючков А. Н., Апарин Г. П., Соболь Л. Н.
Комплекс и технологии тематической обработки данных дистанционного зондирования Земли . . 422
Кондранин Т. В., Козодеров В. В., Дмитриев Е. В., Бобылев В. И.
Восстановление количественных характеристик природно-техногенных объектов по результатам попиксельной обработки авиационных гиперспектральных изображений 426
Мандрикова О. В., Соловьев И. С.
Автоматический способ вычисления индекса геомагнитной активности K на основе вейвлет-пакетов430

Приложения в области медицины, биологии, биометрии 434
Анциперов В. Е., Обухов Ю. В.
Многомасштабный корреляционный анализ в задачах распознавания эпилептических разрядов . 434
Бакина И. Г.
Идентификация личности по форме ладони и голосу 438
Бойко А. И., Ольшевец М. М., Устинин М. Н.
Интеллектуальный анализ цифровых рентгеновских снимков в системе для массовой диагностики остеопороза 442
Дорофеюк А. А., Гучук В. В., Десова А. А., Покровская И. В.
Оценка состояния утомления человека-оператора на базе характеристик пульсового сигнала лучевой артерии 446
Маръяскин Е. Л., Ивановский С. А., Немирко А. П.
Подход к ангиографической диагностике с помощью вычисления оптического потока 450
Немирко А. П., Манило Л. А., Калиниченко А. Н., Волкова С. С.
Использование показателей энтропии ЭЭГ-сигнала для распознавания стадий наркоза 454
Обухов Ю. В., Морозов А. А., Королёв М. С., Полупанов А. Ф.
Метод анализа фазовой синхронизации многоканальных электроэнцефалограмм 458
Устинин М. Н., Панкратова Н. М., Панкратов А. Н.
Обнаружение полезного сигнала на фоне шумов большой амплитуды в задачах анализа данных магнитной энцефалографии 461
Ушмаев О. С.
Комплексирование биометрических классификаторов 465

Приложения в области биоинформатики 469
Гусев В. Д., Мирошниченко Л. А.
Использование сложностных разложений в задачах анализа символьных последовательностей . . 469
Дедус Ф. Ф., Тетуев Р. К.
Спектрально-аналитический подход к задачам биоинформатики 473
Назипова Н. Н., Тетуев Р. К.
Спектральный метод дифференцирования функций в задаче поиска мегасателлитных тандемных повторов 477
Панкратов А. Н., Руднев В. Р., Куликова Л. И., Дедус Ф. Ф., Ефимов А. В.
Распознавание супервторичных структур в глобулярных белках на основе спектрально-аналитического метода 481

Тетуев Р. К., Дедус Ф. Ф., Ольшевец М. М., Панкратов А. Н., Пятков М. И., Назипова Н. Н.
Об оценке осцилляции GC% при поиске тандемных повторов 483
Торшин И. Ю.
Анализ мотивов в задаче распознавания вторичной структуры белка на основе критерия разрешимости 487
Чалей М. Б., Кутыркин В. А.
Профильно-статистическая основа локальных сигналов в ДНК 491

Приложения в области анализа текстов и информационного поиска 495
Spirin N. V.
Application of monotonic correction to learning to rank 495
Авдеева Н. В., Ботов П. В., Букаев А. С., Вислый А. И., Груздев И. А., Житлухин Д. А., Романов М. Ю., Чехович Ю. В.
Внедрение системы «Антиплагиат» в Российской государственной библиотеке 499
Галеев И. Х.
Математическая модель управления процессом обучения в ИОС 504
Корнилина Е. Д., Петров А. П.
Применение латентно-семантического анализа к исследованию политических блогов 508
Кудинов П. Ю., Полежаев В. А.
Динамическое обучение распознаванию статистических таблиц 512
Михайлов Д. В., Емельянов Г. М.
Семантическая схожесть текстов в задаче автоматизированного контроля знаний 516

Приложения в промышленности и транспорте 520
Humphreys P.
Intellectualization of group communication and decision support: the decision hedgehog 520
Derbek P., Hrubes P.
Modeling of the traffic emission load from data of the toll gates system 524
Zelinka T., Svitek M., Bouchner P.
Service quality management in transport telematics solutions 528
Бахшиян Б. Ц., Назиров Р. Р., Федяев К. С.
Выбор оптимального по точности состава бортовых оптических измерений в задаче оценивания расстояния до цели 532
Помазков А. А., Черноплёков А. Н.
О задачах синтеза метрик, связанных с поиском прецедентов для оценки промышленных рисков 536
Чехович Ю. В.
Об идентификации имитационных моделей сложных социально-технических систем по агрегированным данным 539

Алфавитный указатель

B

Belyaev M. G. 200, 204
Bernstein A. V. 208, 212
Borisov A. E 99
Bouchner P. 528
Burnaev E. V. 200, 204, 208

D

Derbek P. 524

G

Ganebnykh S. 313
Geppener V. V. 414
Glumov N. I. 303, 307
Goreva T. S. 414

H

Hassner T. 103
Hrubes P. 524
Humphreys P. 520

K

Klionskiy D. M. 414
Koltsov P. P. 311
Kropotov D. 103, 403
Kuleshov A. P. 208, 212

L

Lange M. 313
Laptev D. 403
Letmathe P. 107

M

Mandrikova O. V. 414
Mitekin V. A. 303, 307
Murashov D. M. 317

O

Osokin A. 5, 403

P

Prihodko P. V. 200, 204

S

Spirin N. V. 495
Strijov V. V. 107
Svitek M. 528

T

Tuv E. V 99

V

Vetrov D. 5, 103, 403
Vetrov D. E. 216

W

Wolf L. 103

Z

Zelinka T. 528

А

Абламейко С. В. 418, 422
Абрамов В. И. 9
Авдеева Н. В. 499
Анциперов В. Е. 434
Апарин Г. П. 418, 422

Б

Бакина И. Г. 438
Бауман Е. В. 111, 115, 125, 173
Бахшиян Б. Ц. 532
Береснев В. Л. 236
Бериков В. Б. 13
Бернштейн А. В. 220
Бобылев В. И. 426
Бойко А. И. 442
Борисова И. А. 17
Ботов П. В. 20, 499
Броневич А. Г. 321
Букаев А. С. 499
Бурнаев Е. В. 220
Бычкова С. М. 346

В

Ветров Д. Е. 232
Визильтер Ю. В. 387
Вислый А. И. 499
Волкова С. С. 454
Воронцов К. В. 24, 157

Г

Галеев И. Х. 504
Гашников М. В. 325
Генрихов И. Е. 117
Гимади Э. Х. 240
Глумов Н. И. 375
Голиков А. И. 244
Гольдовская М. Д. 115
Гончаров А. В. 321, 355
Горшенин А. К. 224
Гофман Н. Г. 258
Груздев И. А. 499
Гуревич И. Б. 329
Гуров С. И. 28
Гусев В. Д. 469
Гучук В. В. 446

Д

Двоенко С. Д. 121
Дегтярёв Н. А. 334
Дедус Ф. Ф. 473, 481, 483

Демин Д. С. 407
Дереза А. В. 299
Десова А. А. 446
Дмитриев Е. В. 426
Долгушев А. В. 248
Донской В. И. 32
Дорофеев Н. Ю. 35
Дорофеюк А. А. 111, 125, 129, 188, 446
Дорофеюк Ю. А. 165, 173, 188
Дулькейт В. И. 293
Дышкант Н. Ф. 339
Дьяконов А. Г. 39, 61
Дюбанов В. В. 133
Дюкова Е. В. 43, 47, 117

Е

Евтушенко Ю. Г. 244
Ежова Е. О. 51
Емельянов Г. М. 516
Ерзин А. И. 251
Ермаков А. С. 343
Ефимов А. В. 481

Ж

Жарких А. А. 346
Житлухин Д. А. 499
Жукова К. В. 350
Журавлёв Ю. И. 55

З

Забудский Г. Г. 255
Загоруйко Н. Г. 133, 137
Заозерская Л. А. 258

И

Ивановский С. А. 450
Ивахненко А. А. 57, 157
Игнатов Д. И. 140
Инякин А. С. 157

К

Калиниченко А. Н. 454
Каминская А. Ю. 140
Каркищенко А. Н. 355, 359
Карпович П. А. 61
Кельманов А. В. 248, 262, 266, 270
Кий К. И. 367
Киселёва Н. Е. 129
Китлер С. В. 192
Козодеров В. В. 426
Колоколов А. А. 258, 274
Кондраков И. А. 228
Кондранин Т. В. 426
Копенков В. Н. 144
Копылов А. В. 387, 410
Корнилина Е. Д. 508
Королёв В. Ю. 224
Королёв М. С. 458
Коротков Д. Ю. 297
Котик С. В. 371
Кочетов Ю. А. 278
Кочетова Н. А. 282
Красоткина О. В. 51, 148, 410
Крымова Е. А. 153
Крючков А. Н. 418, 422
Кудинов П. Ю. 512
Кузнецов А. В. 375
Кузнецов С. О. 140
Куликова Л. И. 481
Кулькова Г. В. 115
Кутыркин В. А. 491

Л

Лагздин А. Ю. 255
Лбов Г. С. 13
Леванова Т. В. 274
Лепский А. Е. 379
Лисица А. В. 157
Лукьянова Е. А. 299

М

Магизов Р. А. 140
Майсурадзе А. И. 65
Мандель А. С. 161, 165
Мандрикова О. В. 430
Манило Л. А. 454
Маркевич С. В. 232
Марьяскин Е. Л. 450
Маслакова С. Н. 169
Матросов В. Л. 68
Махина Г. А. 71
Мехедов И. С. 383
Мирошниченко Л. А. 469
Митекин В. А. 363
Михайлов Д. В. 516
Михайлова Л. В. 270
Мнухин В. Б. 359
Мокшанина Д. А. 395
Морозов А. А. 458
Москаленко Н. Е. 111
Моттль В. В. 9, 51, 148, 176, 410
Мясников В. В. 325

Н

Назипова Н. Н. 477, 483
Назиров Р. Р. 532
Неделько В. М. 73
Немирко А. П. 450, 454
Нефёдов В. Ю. 47

О

Обухов Ю. В. 434, 458
Ольшевец М. М. 442, 483

П

Панкратов А. Н. 461, 481, 483

Панкратова Н. М. 461
Панов М. Е. 176
Панферов А. В. 121
Петров А. П. 508
Плясунов А. В. 286
Покровская И. В. 125, 173, 446
Полежаев В. А. 512
Полежаева Е. А. 77
Полупанов А. Ф. 458
Помазков А. А. 536
Посыпкин М. А. 244, 290
Приймак А. Ю. 410
Пяткин А. В. 266
Пятков М. И. 483

Р

Рейер И. А. 350
Решетняк И. М. 24
Романов М. Ю. 499
Рудаков К. В. 81
Руднев В. Р. 481

С

Сергеев В. В. 144
Середин О. С. 9, 169, 334, 343
Синцова В. В. 157
Скипор К. С. 180
Сметанин А. Ю. 297
Соболь Л. Н. 422
Соловьев И. С. 430
Сотикова Е. Е. 418
Сотнезов Р. М. 43
Стреляев В. С. 387
Стрижов В. В. 153, 180
Сулимова В. В. 9

Т

Татарчук А. И. 176
Ташлинский А. Г. 391, 399
Тетуев Р. К. 473, 477, 483
Тимбай Е. И. 144
Толстихин И. О. 83
Торшин И. Ю. 487
Турков П. А. 148

У

Устинин М. Н. 442, 461
Ушмаев О. С. 465

Ф

Файзуллин Р. Т. 293
Федоренко А. С. 274
Федосеев В. А. 363
Федотов Н. Г. 395
Федяев К. С. 532
Филипенков Н. В. 184
Фрей А. И. 87

Х

Хамидуллин С. А. 270
Хачай М. Ю. 91
Хныкин И. Г. 293
Хорева А. М. 399

Ч

Чалей М. Б. 491
Чернов В. М. 95
Чернова С. С. 232
Черноплёков А. Н. 536
Чернявский А. Л. 129, 188
Чехович Ю. В. 499, 539
Чуличков А. И. 407

Ш

Шамардин Ю. В. 251
Шананин А. А. 228
Шибзухов З. М. 68
Шоргин С. Я. 224

Я

Янковская А. Е. 192, 196
Яшина В. В. 329

Научное издание

Интеллектуализация обработки информации

Сборник докладов
8-й международной конференции ИОИ-2010

Напечатано с готового оригинал-макета

Издательство ООО «МАКС Пресс»
Лицензия ИД №00510 от 01.12.1999
Подписано в печать 23.09.2010
Печать офсетная. Бумага офсетная.
Формат 60×88 1/8. Усл. печ. л. 69,5. Тираж 300 экз. Изд. № 416 Заказ .

119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М. В. Ломоносова,
2-й учебный корпус, 627 к.
Тел. 939-3890, 393-3891, Тел./Факс. 939-3891.