

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ε -СЕТЕЙ ДЛЯ ЛИНЕЙНОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ДВУХ МНОЖЕСТВ В ПРОСТРАНСТВЕ R^d

Аннотация. Введено понятие ε -разделимости двух множеств. Доказаны необходимые и достаточные условия ε -разделимости, а также сведение задачи ε -разделения двух множеств к задаче разделения их ε -сетей, которые не пересекаются.

Ключевые слова: эпсилон-сети, разделение множеств, размерность Вапника–Червоненкиса.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть заданы два конечных множества: $A \subset R^d$ и $B \subset R^d$, мощности которых $|A| = n_A$, $|B| = n_B$. Предположим, что $A \not\subset \text{conv}_B$, $B \not\subset \text{conv}_A$. В простейшем случае, если выпуклые оболочки множеств $A \subset R^d$ и $B \subset R^d$ не пересекаются, их можно разделить, т.е. найти гиперплоскость, относительно которой данные множества будут находиться по разные стороны. Предположим, что множества неразделимы, т.е. $\text{conv}(A) \cap \text{conv}(B) \neq \emptyset$. Возникает вопрос, в каком случае данные множества можно разделить, исключив из них небольшое количество точек, например $\varepsilon \in (0, 1)$ частей от общего количества.

На данный момент существует большое количество методов классификации, каждый из которых имеет преимущества и недостатки. Наиболее популярный из них — дискриминантный анализ Фишера [1]. Он широко используется в таких отраслях информатики, как машинное обучение, поиск информации и распознавание образов. Сложность алгоритма линейного дискриминантного анализа оценивается как $O(ndt + t^3)$, где n — количество наблюдений в обучающей выборке, d — количество признаков, $t = \min(n, d)$ [2]. Поэтому при больших значениях n и d алгоритм использовать невозможно.

Байесовский классификатор [3] оптимальный, легко реализуется программно, на его основе построено много методов классификации. Однако поскольку на практике функции правдоподобия классов восстанавливают по конечным выборкам данных, байесовский классификатор перестает быть оптимальным [4]. Его сложность алгоритма оценивается как $O(nd)$ [5].

Сравнительно новый метод опорных векторов, известный в литературе как SVM [6] благодаря принципу оптимальной разделяющей гиперплоскости, приводит к максимизации ширины разделяющей полосы между классами. Таким образом, этот метод способствует более увереной классификации. Однако наряду с этим он нестойкий к шуму в исходных данных. Существенным недостатком метода является отсутствие разработанных общих методов построения выпрямляющих пространств и ядер, которые наилучшим образом подходят к конкретной задаче [7]. Сложность алгоритма метода опорных векторов оценивается как $O(n^3)$ [8]. Классификация с помощью кластерного анализа, а также вальдовский последовательный анализ с применением информационной меры Кульбака описаны в работе [9].

ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Определение 1. Множества A и B называются ε -разделимыми, если существуют $A_1 \subset A$, $B_1 \subset B$, для которых

$$\text{conv}(A \setminus A_1) \cap \text{conv}(B \setminus B_1) = \emptyset, \quad (1)$$

$$|A_1| + |B_1| < \varepsilon(n_A + n_B). \quad (2)$$

Определение 2. Гиперплоскость L называется разделяющей для множеств A и B , если

$$\text{conv}_A \subset L^+, \quad \text{conv}_B \subset L^-.$$

Определение 3. Гиперплоскость L_ε называется ε -разделяющей для множеств A и B , если

$$\frac{|A \cap L_\varepsilon^+| + |B \cap L_\varepsilon^-|}{n_A + n_B} \geq 1 - \varepsilon.$$

Для решения задачи нахождения ε -разделяющей гиперплоскости двух множеств будем использовать ε -сети. Рассмотрим ранжированное пространство (X, \mathcal{R}) , где X — некоторое множество, \mathcal{R} — совокупность подмножеств множества X [10].

Определение 4. Проекцией \mathcal{R} на A называется множество

$$\text{Pr}_A(\mathcal{R}) = \{r \cap A : r \in \mathcal{R}\}.$$

Определение 5. Считают, что A дробится с помощью \mathcal{R} , если $\text{Pr}_A(\mathcal{R}) = 2^A$.

Определение 6. Размерностью Вапника–Червоненкиса для ранжированного пространства (X, \mathcal{R}) называется мощность (возможно, бесконечная) наибольшего подмножества из X , которое дробится с помощью \mathcal{R} :

$$VC(X, \mathcal{R}) := \max\{m : \exists A \subset X, A \text{ дробится с помощью } \mathcal{R}\}.$$

Теорема Радона. Каждое множество из $d+2$ или более точек в R^d может быть представлено как объединение двух непересекающихся множеств, выпуклые оболочки которых имеют общую точку [11].

Следствие [10]. Размерность Вапника–Червоненкиса для ранжированного пространства (R^d, H^d) , где H^d — совокупность всех полупространств в R^d , определяется как $VC(R^d, H^d) = d+1$.

Определение 7. Пусть заданы ранжированное пространство (X, \mathcal{R}) , множество $A \subset X$ и $\varepsilon \in R$, $0 < \varepsilon < 1$, тогда подмножество $N \subset A$ называется ε -сетью для множества A , если $\forall r \in \mathcal{R} : |r \cap A| \geq \varepsilon |A| \Rightarrow N \cap (r \cap A) \neq \emptyset$.

Теорема Вельцля–Хаусслера [12]. Пусть $VC(X, \mathcal{R}) = \delta < \infty$, тогда $\forall A \subset X$, $|A| = n$, $\forall \varepsilon \in (0, 1)$ существует ε -сеть N множества A , мощность которой не зависит от мощности множества A , кроме того $|N| \leq \frac{8\delta}{\varepsilon} \log_2 \frac{8\delta}{\varepsilon}$.

ε -РАЗДЕЛЕНИЕ МНОЖЕСТВ В ПРОСТРАНСТВЕ R^d

Рассмотрим ранжированное пространство (R^d, H^d) , где H^d — совокупность всех полупространств в R^d . В (R^d, H^d) будем строить ε -сети множеств A и B . Покажем, что задачу ε -разделения множеств A и B можно свести к задаче разделения выпуклых оболочек их непересекающихся ε -сетей. Сформулируем основную теорему данной статьи.

Теорема 1. Чтобы множества A и B были ε -разделимыми, необходимо и достаточно существования $\varepsilon_A, \varepsilon_B$ и соответствующих им ε -сеток $N_{\varepsilon_A}^A, N_{\varepsilon_B}^B$ в (R^d, H^d) , для которых выполняются соотношения

$$\varepsilon_A n_A + \varepsilon_B n_B < \varepsilon(n_A + n_B), \quad (3)$$

$$\text{conv } N_{\varepsilon_A}^A \cap \text{conv } N_{\varepsilon_B}^B = \emptyset. \quad (4)$$

Доказательство. Необходимость. Предположим, что множества A и B ε -разделимы. Обозначим $|A_1| = n_{A_1}$, $|B_1| = n_{B_1}$. Пусть $\varepsilon_A = \frac{n_{A_1}}{n_A} + \delta$, $\varepsilon_B = \frac{n_{B_1}}{n_B} + \delta$,

где δ выбрано из условия $(n_{A_1} + n_{B_1}) + 2\delta < \varepsilon(n_A + n_B)$. Тогда в качестве сетей можно использовать $N_{\varepsilon_A}^A = A \setminus A_1$, $N_{\varepsilon_B}^B = B \setminus B_1$. Согласно (1) выполняется соотношение (4), согласно (2) — неравенство (3).

Достаточность. Предположим, что выполняются условия (3), (4) теоремы 1. Докажем, что множества A и B являются ε -разделимыми. Пусть множества A и B не являются ε -разделимыми. Это значит, что условие (1) может выполняться только в том случае, когда

$$n_{A_1} + n_{B_1} \geq \varepsilon(n_A + n_B). \quad (5)$$

Поскольку выполняется соотношение (4), то для $\text{conv } N_{\varepsilon_A}^A$ и $\text{conv } N_{\varepsilon_B}^B$ существует разделяющая гиперплоскость. Предположим, что $\text{conv } N_{\varepsilon_A}^A \in L_+$ и $\text{conv } N_{\varepsilon_B}^B \in L_-$. Обозначим $A^N = \{x \in A : x \in L_+\}$, $B^N = \{x \in B : x \in L_-\}$. Множества $A \setminus A^N$ и $B \setminus B^N$ согласно определению ε -сетей удовлетворяют соотношениям $|A \setminus A^N| < \varepsilon_A n_A$, $|B \setminus B^N| < \varepsilon_B n_B$.

Рассмотрим множества, которые исключаем: $A_1 = A \setminus A^N$, $B_1 = B \setminus B^N$. Тогда для этих множеств согласно условию (3) $n_{A_1} + n_{B_1} < \varepsilon(n_A + n_B)$. Таким образом, неравенство (5) для данных множеств не выполняется. Получаем противоречие.

Достаточность доказана. Теорема 1 доказана.

Введем обозначения $\eta_A = \frac{|A \cap \text{conv } B|}{n_A}$, $\eta_B = \frac{|B \cap \text{conv } A|}{n_B}$ и $\varepsilon_A = \eta_A + \frac{1}{n_A}$, $\varepsilon_B = \eta_B + \frac{1}{n_B}$.

Теорема 2. Пусть

$$\varepsilon > \frac{\eta_A n_A + \eta_B n_B}{n_A + n_B},$$

тогда для любой ε -разделяющей гиперплоскости L_ε множеств A и B существуют ε -сети $N_{\varepsilon_A}^A$ и $N_{\varepsilon_B}^B$, для которых L_ε — разделяющая гиперплоскость.

Доказательство. Будем строить ε -сеть $N_{\varepsilon_A}^A$ таким образом, чтобы в ее не попали те точки множества A , которые принадлежат выпуклой оболочке $\text{conv } B$. Поскольку $\varepsilon_A > \eta_A$, то $\forall r: |r \cap A| \geq \varepsilon_A n_A$ существует точка x такая, что $x \in (r \cap A)$, но $x \notin \text{conv } B$. При построении ε -сети $N_{\varepsilon_A}^A$ в качестве представителя множества r будем использовать точку x такую, что $x \notin \text{conv } B$. Благодаря полу-пространствам r , для которых $|r \cap A| = \eta_A n_A + 1$ и $|(r \cap A) \cap \text{conv } B| = \eta_A n_A$, ε -сеть $N_{\varepsilon_A}^A$ содержит все те точки множества A , которые являются ближайшими соседями к пересечению $A \cap \text{conv } B$.

Поскольку ε -сети $N_{\varepsilon_A}^A$ и $N_{\varepsilon_B}^B$ содержат всех ближайших соседей к пересечениям $A \cap \text{conv } B$ и $B \cap \text{conv } A$ и не содержат точек, принадлежащих этим пересечениям, можно утверждать, что среди разделяющих гиперплоскостей для множеств $N_{\varepsilon_A}^A$ и $N_{\varepsilon_B}^B$ найдется гиперплоскость, которая ε -разделяет множества A и B .

Теорема 2 доказана.

Итак, задачу ε -разделения двух пересекающихся множеств (A и B) можно свести к тривиальной задаче разделения двух выпуклых непересекающихся множеств ($\text{conv}N_{\varepsilon_A}^A$ и $\text{conv}N_{\varepsilon_B}^B$).

Обозначим $n_{\varepsilon_A} = |N_{\varepsilon_A}^A|$, $n_{\varepsilon_B} = |N_{\varepsilon_B}^B|$. Поскольку сложность алгоритма поиска ε -сети линейная [13], а построение выпуклых оболочек для ε -сетей $N_{\varepsilon_A}^A$ и $N_{\varepsilon_B}^B$, например, методом Джарвиса оценивается как $O(n_{\varepsilon_A}^2)$ и $O(n_{\varepsilon_B}^2)$ [14], то общую сложность алгоритма ε -разделения множеств A и B с использованием ε -сетей можно оценить как $O(m + m_\varepsilon^2)$, где $m = \max(n_A, n_B)$, $m_\varepsilon = \max(n_{\varepsilon_A}, n_{\varepsilon_B})$.

Таким образом, доказано, что для ε -разделимости двух множеств необходимо и достаточно существования некоторых разделимых ε -сетей этих множеств. Предложен метод построения разделимых ε -сетей и показано, что задачу разделения двух пересекающихся множеств можно свести к задаче разделения двух непересекающихся выпуклых множеств.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fisher R. A. The use of multiple measurements in taxonomic problems // Annals of Eugenics. — 1936. — N 7. — P. 179–188.
2. Deng Cai, Xiaofei He, Jiawei Han. Training linear discriminant analysis in linear time. — http://researchweb.iit.ac.in/~nataraj.j/poseSearchReports/icde08_dengcai.pdf.
3. Айвазян С. А., Бухштабер В. М., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика: классификация и снижение размерности. — М.: Финансы и статистика, 1989. — 607 с.
4. Воронцов К. В. Лекции по статистическим (байесовским) алгоритмам классификации: <http://www.ccas.ru/voron/download/Bayes.pdf>.
5. Chris Fleizach, Satoru Fukushima. A naive Bayes classifier on 1998 KDD Cup. — <http://sysnet.ucsd.edu/~cfleizac/cse250b/project1.pdf>.
6. Vapnik V. N. The nature of statistical learning theory. — 2nd ed. — New York: Springer, 2000. — 314 p.
7. Воронцов В. К. Лекции по методу опорных векторов. — <http://www.ccas.ru/voron/download/SVM.pdf>.
8. Ivor W. Tsang, James T. Kwok, Pak-Ming Cheung. Core vector machines: fast SVM training on very large data sets // Journal of Machine Learning Research. — 2005. — N 6. — P. 363–392.
9. Иванчук М. А., Малык И. В. Сравнение методов распределения наблюдений на классы при прогнозировании наличия осложнений у тяжелобольных // Кибернетика и системный анализ. — 2015. — № 2. — С. 164–174.
10. Райгородский А. М. Системы общих представителей в комбинаторике и их приложения в геометрии. — М.: МЦНМО, 2009. — 136 с.
11. Данцер Л., Грюнбаум Б., Кли В. Теорема Хелли. — М.: Мир, 1968. — 162 с.
12. Haussler D., Welzl E. ε -nets and simplex range queries // Discrete & Computational Geometry. — 1987. — N 2. — P. 127–151.
13. ICS Theory Group. Computational Statistics. — <https://www.ics.uci.edu/~eppstein/280/cluster.html>.
14. Препарата Ф., Шеймос М. Вычислительная геометрия: Введение. — М.: Мир, 1989. — С. 478.

Поступила 27.04.2015