Труды МАИ. Выпуск № 109 DOI: 10.34759/trd-2019-109-20
УДК 519.85

Выпуклые оболочки и выпукло отделимые множества в задаче многоклассового распознавания образов

Гайнанов Д.Н.[1*], Чернавин Н.П.[3], Чернавин П.Ф.[2], Чернавин Ф.П.[3], Рассказова В.А.[1***]**

[1]*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ, Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия*

[2]*Уральский Федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, УрФУ, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия*

[3]*Институт экономики Уральского отделения Российской академии наук, ИЭ УрО РАН, ул. Московская, 29, Екатеринбург, 620014, Россия*

**e-mail: damir.gainanov@gmail.com*

***e-mail: chernavin.p.f@gmail.com*

****e-mail: varvara.rasskazova@mail.ru*

Статья поступила 22.11.2019

Аннотация

В работе предлагается подход к решению многоклассовой задачи распознавания образов в геометрической постановке на основе построения выпуклых оболочек и определения выпукло отделимых множеств (ВО-множеств). Достоинством предлагаемого метода является единственность получаемого решения и однозначность отнесения каждой точки исходного пространства к одному из классов. Также в подходе единственным образом осуществляется фильтрация исходных данных на предмет выбросов. Вычислительные эксперименты с использованием разработанного подхода проводятся на академических примерах и на тестовых данных публичных библиотек.

Ключевые слова: классификация, распознавание образов, алгоритм, решающее правило, выпуклая оболочка, выпукло отделимое множество.

Введение

В работе исследуется задача многоклассового распознавания образов в геометрической постановке. В основе предлагаемого метода решения такой задачи лежит идея отделимости выпуклых оболочек множеств обучающей выборки. Для реализации этого метода рассматриваются две вспомогательные задачи: задача выделения экстремальных точек в конечном множестве точек пространства $\mathbb{R}^n$, и задача определения расстояния от заданной точки до выпуклой оболочки конечного множества точек в пространстве $\mathbb{R}^n$ с применением инструментов известных пакетов программ для решения задач математического программирования.

Для задачи выделения экстремальных точек и гиперграней выпуклой оболочки конечного множества точек A в пространстве $\mathbb{R}^n$ предлагается новый двухэтапный беспереборный алгоритм, основанный на двойственной связи семейства гиперграней многогранников конечномерного пространства и семейством минимальных по включению несовместных подсистем (МНП) некоторой несовместной системы линейных неравенств (первый этап предлагаемого алгоритма) и применении метода свертывания С. Н. Черникова [12] для выделения семейства всех МНП соответствующей несовместной системы линейных неравенств. Возможности предлагаемого подхода демонстрируются на классической задаче Ирисы Фишера [16].

Пусть задано множество n-мерных векторов в пространстве $\mathbb{R}^n$

$$\mathrm{A} = \left\{ \mathrm{a}_i = \left(a_{i1}, a_{i2}, ..., a_{in} \right) \right\} : i = \left[1, N \right], \tag{1}$$

и его разбиение на m классов

$$\mathrm{A} = A_1 \dot{\cup} A_2 \dot{\cup} \ldots \dot{\cup} A_m . \tag{2}$$

Необходимо построить решающее правило для отнесения вектора a_i к одному из m классов.

Существует целый ряд методов [14, 23] решения этой многоклассовой задачи распознавания образов в геометрической постановке: линейные классификаторы, комитетные конструкции, многоклассовая логистическая регрессия, методы опорных векторов, ближайших соседей, потенциальных функций. Данные методы относятся к метрическим методам классификации и базируются на возможности измерить расстояние между классифицируемыми объектами, либо расстояние между объектами и гиперповерхностями разделяющими классы в пространстве признаков. В настоящей работе развивается подход, связанный с построением выпуклых оболочек подмножеств $A_i,\ i = \left[1, m \right]$, множества A.

Алгоритм многоклассового распознавания образов на основе построения выпуклых оболочек

Основная идея предлагаемого подхода состоит в следующем. Пусть для некоторого множества точек , где $i \in \left[1, m \right]$, выпуклая оболочка $conv\, A_i^{'}$ содержит только точки из класса A_i. Тогда естественно предположить, что любая точка $x \in conv\, A_i^{'}$ представляет вектор, также относящийся к этому же классу A_i. Ниже мы последовательно разовьем эту идею на общий случай $A_i^{'} \subseteq A_i$.

Определение 1. Множество A_i из (2), где $i \in [1, m]$, будем называть выпукло отделимым множеством (ВО-множеством, ВОМ), если

$$conv\, A_i \cap A_j = \varnothing,\ \forall\ j \in [1, m] \setminus \{i\}. \tag{3}$$

В случае, если в семействе множеств $\mathrm{A} = \{A_1, \ldots, A_m\}$ найдется ВОМ A_{i_0}, естественно предположить, что $class(x) = i_0\ \forall\ x \in conv\, A_{i_0}$. В этом случае множество A_{i_0} можно исключить из дальнейшего процесса построения решающего правила при условии, что в таком правиле в первую очередь проверяется условие $x \in conv\, A_{i_0}$ и только, в случае если $x \notin conv\, A_{i_0}$, рассматриваются дальнейшие варианты.

Интересен случай семейств из (1), когда можно указать последовательность $(i_1, i_2, \ldots, i_m)$, являющуюся перестановкой для последовательности $(1, 2, \ldots, m)$ такую, что

$$\begin{cases} conv\, A_{i_1} \cap \bigcup\limits_{k=2}^{m} A_{i_k} = \varnothing, \\ conv\, A_{i_2} \cap \bigcup\limits_{k=3}^{m} A_{i_k} = \varnothing, \\ \ldots, \\ conv\, A_{i_{m-1}} \cap A_m = \varnothing. \end{cases} \tag{4}$$

Задачу построения решающего правила для семейства (1), удовлетворяющего условиям (4), будем называть ВОМ-разрешимой. Геометрическую интерпретацию такого случая иллюстрирует Рис. 1.

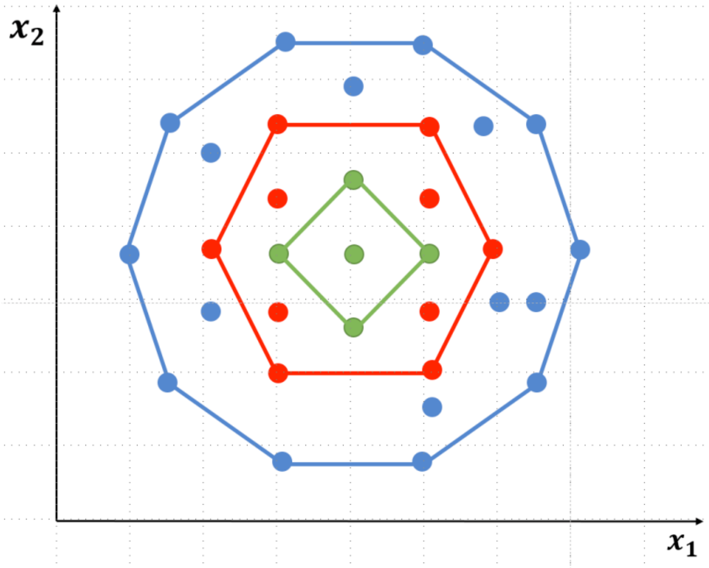


Рис. 1: BOM-разрешимая задача

Ниже будем обозначать через $class(x)$ номер класса из $[1,m]$, к которому относится точка x. Таким образом, если $x \in A_i$, $i \in [1,m]$, то $class(x) = i$. Для точки $x \notin \mathrm{A}$ задача распознавания образов в геометрической постановке как раз и состоит в построении решающего правила для определения $class(x)$ для $x \in \mathbb{R}^n$, A.

Рассмотрим сначала случай $m = 2$, т. е. $\mathrm{A} = A_1 \dot{\cup} A_2$. Построим выпуклые оболочки $conv\, A_1$ и $conv\, A_2$. Естественно предположить, что если $x \in conv\, A_1$, $conv\, A_2$, то $class(x) = 1$.

Аналогично, если $x \in conv\, A_2$, $conv\, A_1$, то полагаем $class(x) = 2$. Если $x \notin conv\, A_1 \cup conv\, A_2$, то естественно предположить, что точка x принадлежит к тому классу, выпуклая оболочка которого располагается ближе к точке x.

Обозначим через $\rho\left(x, conv\, A'\right)$ расстояние от точки x до выпуклой оболочки конечного множества $A' \subset \mathbb{R}^n$. Тогда имеем

$$class(x) = arg\min_{i\in\{1,2\}}\left(\rho\left(x, conv\ A_i\right)\right).$$

Наконец, рассмотрим случай $x \in conv\ A_1 \cap conv\ A_2$.

Рассмотрим два множества

$$\begin{aligned} A_1^{'} &= A_1 \cap conv\ A_1 \cap conv\ A_2, \\ A_2^{'} &= A_2 \cap conv\ A_1 \cap conv\ A_2. \end{aligned} \tag{5}$$

Логически возможны случаи:

$$\left.\begin{aligned} &1.\ A_1^{'} = \varnothing, A_2^{'} = \varnothing \\ &2.\ A_1^{'} \neq \varnothing, A_2^{'} = \varnothing \\ &3.\ A_1^{'} = \varnothing, A_2^{'} \neq \varnothing \\ &4.\ A_1^{'} \neq \varnothing, A_2^{'} \neq \varnothing \end{aligned}\right\} \tag{$*$}$$

Пусть $x \in conv\ A_1 \cap conv\ A_2$. Тогда полагаем:

$class(x)$ не определен для случая 1,
$class(x) = 1$ для случая 2,
$class(x) = 2$ для случая 3.

Случай 4 приводит нас к следующей ситуации. Имеем семейства двух подмножеств $\mathrm{A}^{'} = \left\{A_1^{'}, A_2^{'}\right\}$, расположенных внутри множества $conv\ A_1 \cap conv\ A_2$. Необходимо построить решающее правило для отнесения вектора $x \in conv\ A_1 \cap conv\ A_2$ к одному из двух классов $A_1^{'}, A_2^{'}$ и соответственно A_1, A_2.

Данная задача в точности совпадает с формулировкой нашей исходной задачи, и поэтому к ней может быть повторно применен наш алгоритм. Повторяя процесс необходимое количество раз, мы придем к ситуации, когда для очередных выпуклых множеств вида (5) имеем $conv\ A_1^{''} \cap conv\ A_2^{''} = \varnothing$, тем самым процесс будет завершен.

Утверждение 1. Если для множеств A_1, A_2 имеем $A_1 \cap A_2 = \varnothing$, то описанный выше алгоритм распознавания всегда сходится, т. е. для любой точки x он приведет к ситуации 1, 2 или 3 (∗).

Доказательство. Рассмотрим следующую цепочку пар множеств

$$A = A_1 \cup A_2,\ C_1 = conv\ A_1, C_2 = conv\ A_2$$

$$A_1^{(1)} = A_1 \cap C_1 \cap C_2$$

$$A_2^{(1)} = A_2 \cap C_1 \cap C_2$$

$$A^{(1)} = A_1^{(1)} \cup A_2^{(1)},\ C_1^{(1)} = conv\ A_1^{(1)}, C_2^{(1)} = conv\ A_2^{(1)}$$

$$A_1^{(2)} = A_1^{(1)} \cap C_1^{(1)} \cap C_2^{(1)}$$

$$A_2^{(2)} = A_2^{(1)} \cap C_1^{(1)} \cap C_2^{(1)}$$

$$\ldots$$

$$A^{(k-1)} = A_1^{(k-1)} \cup A_2^{(k-1)},\ C_1^{(k-1)} = conv\ A_1^{(k-1)}, C_2^{(k-1)} = conv\ A_2^{(k-1)}$$

$$A_1^{(k)} = A_1^{(k-1)} \cap C_1^{(k-1)} \cap C_2^{(k-1)}$$

$$A_2^{(k)} = A_2^{(k-1)} \cap C_1^{(k-1)} \cap C_2^{(k-1)}$$

$$A^{(k)} = A_1^{(k)} \cup A_2^{(k)},\ C_1^{(k)} = conv\ A_1^{(k)}, C_2^{(k)} = conv\ A_2^{(k)}$$

$$\ldots$$

Покажем, что на некотором шаге будет выполнено одно из условий $A_1^{(k)} = \varnothing$ или $A_2^{(k)} = \varnothing$, что и будет означать сходимость предлагаемого алгоритма.

Покажем, что на любом шаге имеем

$$\left| A_1^{(k+1} \cup A_2^{(k+1)} \right| < \left| A_1^{(k)} \cup A_2^{(k)} \right|.$$

Поскольку $A_1 \cap A_2 = \varnothing$, то $A_1^{(k)} \cap A_2^{(k)} = \varnothing$.

С другой стороны,

$$A_1^{(k+1)}, A_2^{(k+1)} \subseteq conv\ A_1^{(k)} \cap conv\ A_2^{(k)}. \qquad (6)$$

Покажем, что найдется точка $x \in A_1^{(k)} \cup A_2^{(k)}$ такая, что $x \in conv\ A_1^{(k)} \cap conv\ A_2^{(k)}$.

Предположим противное:

$$\begin{cases} A_1^{(k)} \subseteq conv\ A_1^{(k)} \cap conv\ A_2^{(k)}, \\ A_2^{(k)} \subseteq conv\ A_1^{(k)} \cap conv\ A_2^{(k)}. \end{cases} \qquad (7)$$

Следовательно, имеем

$$\begin{cases} conv\ A_1^{(k)} \subseteq conv\ A_1^{(k)} \cap conv\ A_2^{(k)}, \\ conv\ A_2^{(k)} \subseteq conv\ A_1^{(k)} \cap conv\ A_2^{(k)}. \end{cases} \qquad (8)$$

С другой стороны, по определению выпуклой оболочки получаем

$$\begin{cases} conv\ A_1^{(k)} \supseteq conv\ A_1^{(k)} \cap conv\ A_2^{(k)}, \\ conv\ A_2^{(k)} \supseteq conv\ A_1^{(k)} \cap conv\ A_2^{(k)}. \end{cases} \qquad (9)$$

Из (8) и (9) следует, что

$$conv\ A_1^{(k)} = conv\ A_2^{(k)}. \qquad (10)$$

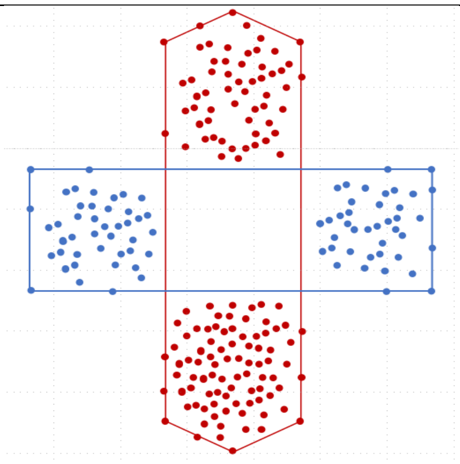
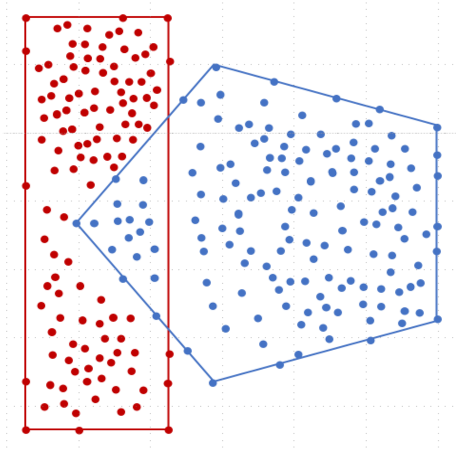
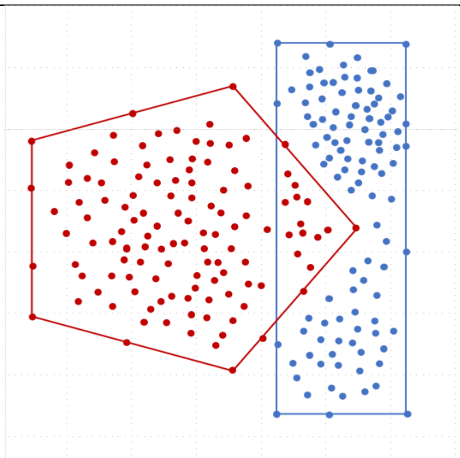
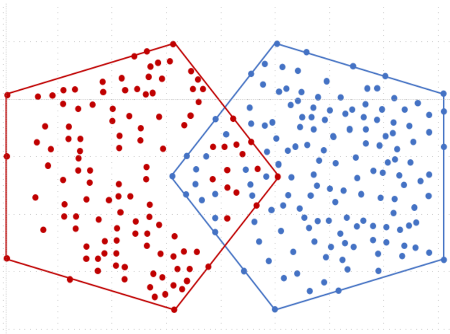
Из (10) в свою очередь следует, что

$$\begin{cases} ext\left(conv\ A_1^{(k)}\right) = ext\left(conv\ A_2^{(k)}\right) \subseteq A_1^{(k)}, \\ ext\left(conv\ A_2^{(k)}\right) = ext\left(conv\ A_2^{(k)}\right) \subseteq A_2^{(k)}. \end{cases} \qquad (11)$$

Следовательно, $A_1^{(k)} \cap A_2^{(k)} \neq \varnothing$, что противоречит предположению. Таким образом, утверждение доказано.

□

В таблице 1 представлены случаи 1-4 (*).

	$A_1^{'} = \varnothing$	$A_1^{'} \neq \varnothing$
$A_2^{'} = \varnothing$		
$A_2^{'} \neq \varnothing$		

Таб. 1: Случаи 1-4 (*)

Рассмотрим случай $m > 2$.

Также, как и в случае $m = 2$ решение задачи многоклассового распознавания образов сведем к решению серии аналогичных задач, характеризующихся последовательным снижением размерности. Для характеристики каждой такой задачи необходимо задать следующие элементы.

$$\left.\begin{aligned}
&X^{'} \subset \mathbb{R}^{n} - \text{подмножество, для точек которого решается задача,}\\
&A^{'} = \left\{A_i^{'} \subseteq A_i : i \in J \subseteq [1,m]\right\} - \text{семейство конечных множеств,}\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \text{для которых решается задача,}\\
&C\left(A^{'}\right) = \left\{C_i^{'} = conv\, A_i^{'} : i \in J \subseteq [1,m]\right\} - \text{семейство выпуклых оболочек}\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \text{множеств серии } A^{'},\\
&J^{'} \subseteq J - \text{множество классов, участвующих в задаче.}
\end{aligned}\right\} \quad (12)$$

Обозначим через $\left\langle x^{'}, X^{'}, J^{'}, A^{'}, C\left(A^{'}\right)\right\rangle$ задачу определения принадлежности точки $x^{'} \in X^{'}$ одному из классов $J^{'} \subset J$, при условии, что задана обучающая выборка $A^{'}$ с набором выпуклых оболочек $C\left(A^{'}\right)$.

Далее классификация точки $x^{'} \in X^{'}$ будет определяться величиной

$$M^{'} = \left|\left\{i \in J^{'} : x^{'} \in C_i^{'}\right\}\right|$$

и «распадаться» на 3 случая: $M^{'} = 0, M^{'} = 1$ и $M^{'} > 1$, где

Правила формирования задачи $\left\langle x^{"}, X^{"}, J^{"}, A^{"}, C\left(A^{"}\right), M^{"}\right\rangle$ в случае $\left|M^{'}\right| > 1$ формулируются следующим образом.

$$\left.\begin{aligned}
&x^{"} = x^{'},\\
&J^{"} = \left\{i \in J^{'} : x^{"} \in C_i^{'}\right\},\\
&M^{'} = \left|J^{"}\right|,\\
&X^{"} = \bigcap\left\{C_i^{'} : i \in J^{"}\right\},\\
&A^{"} = \left\{A_i^{"} = A_i^{'} \cap X^{"} : i \in J^{"}\right\},\\
&C\left(A^{"}\right) = \left\{C_i^{"} = conv\, A_i^{"} : i \in J^{"}\right\}.
\end{aligned}\right\} \quad (13)$$

Таким образом, решающее правило для задачи многоклассового распознавания на основе построения выпуклых оболочек может быть представлено как иерархическое дерево базовых задач вида (12). В корне этого дерева располагается задача

$$Z = \left\langle x, \mathbb{R}^n, J = [q,m], A, C(A) \right\rangle.$$

Обозначим через $Z\left(J^{'}\right)$ задачу вида (13), которая порождается из задачи Z для множества $J^{'} \subseteq J$ такого, что

$$\bigcap \left\{ C_i : i \in J^{'} \right\} \neq \varnothing. \qquad (14)$$

Пусть $\left\{ J_1^{'}, \ldots, J_{k_1}^{'} \right\}$ – семейство всех подмножеств $J^{'} \subseteq J$, удовлетворяющих условию (14). Тогда для задачи Z первого уровня получим k_1 задач вида $Z\left(J_i^{'}\right)$, $i \in [1, k_1]$ второго уровня. Для каждой задачи второго уровня вида $Z\left(J_i^{'}\right)$ будет сгенерирована серия задач следующего уровня вида $Z\left(J_i^{'}\right)\left(J_i^{''}\right)$ и т. д. Вершина в таком иерархическом графе становится терминальной, если участвующая в ее формулировке подвыборка A входит не более, чем в одну из участвующих в ее формулировке выпуклых оболочек. Таким образом, для построения решающего дерева нам необходимо построить иерархический граф задач вида (12) путем построения выпуклых оболочек для порождаемых подвыборок, расположенных не менее, чем в двух выпуклых оболочках порождающей задачи. Для реализации такого алгоритма построения решающего правила необходимо иметь эффективные алгоритмы для решения следующих задач.

(1) Пусть задано конечное множество $A \subseteq \mathbb{R}^n$. Найти все экстремальные точки его выпуклой оболочки $ext(conv\ A)$.

(2) Пусть заданы точка x и множество экстремальных точек многогранника $M - ext(M)$. Определить принадлежность точки x многограннику M, т. е. верно ли, что $x \in conv\, ext(M)$?

(3) Пусть задана точка x и множество экстремальных точек многогранника $M - ext(M)$. Найти кратчайшее расстояние от точки x до M, т. е. найти $\rho(x,M) = \min\{\rho(x,y) : y \in M\}$.

(4) Пусть задано конечное множество $A \subseteq \mathbb{R}^n$. Найти семейство всех гиперграней многогранника $conv\, A$ (например, путем перечисления всех точек из A, принадлежащих каждой гиперграни $conv\, A$).

Алгоритмы построения выпуклых оболочек конечных множеств

Задача поиска экстремальных точек выпуклой оболочки конечного множества точек пространства $\mathbb{R}^n$

Пусть задано конечное множества $A = \{a_1, a_2, \ldots, a_m\}$. Необходимо найти множество экстремальных точек многогранника $conv\, A$. Обозначим такое множество через $ext(conv\, A)$. Одним из способов найти множество $ext(conv\, A)$ является последовательная проверка для каждой точки $a_i \in A$ возможности ее представления в виде выпуклой комбинации оставшихся точек. Для этого достаточно рассмотреть систему:

$$\begin{cases} \sum\limits_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{m} \alpha_j \cdot a_j = a_i, \\ \sum\limits_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{m} \alpha_j = 1, \\ \alpha_j \geq 0,\ j \in [1,m],\ j \neq i. \end{cases} \tag{15}$$

Очевидно, что $a_i \in ext\left(conv\, A\right)$ тогда и только тогда, когда система (15) несовместна.

Задача определения принадлежности точки x выпуклой оболочки конечного множества A в пространстве $\mathbb{R}^n$

Пусть $x \in \mathbb{R}^n$ и $A = \{a_1, a_2, \ldots, a_m\} \subseteq \mathbb{R}^n$, и пусть требуется определить принадлежность точки x множеству $conv\, A$. Рассмотрим систему

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{m} \alpha_i \cdot a_i = x, \\ \sum\limits_{i=1}^{m} \alpha_i = 1, \\ \alpha_i \geq 0,\ \ i \in [1,m]. \end{cases} \tag{16}$$

Очевидно, что точка $x \in conv\, A$ тогда и только тогда, когда система (16) совместна.

Задача вычисления кратчайшего расстояния от точки до выпуклого множества в пространстве $\mathbb{R}^n$

Пусть $b \in \mathbb{R}^n$ и $A = \{a_1, a_2, \ldots, a_m\} \subseteq \mathbb{R}^n$, и пусть требуется найти $\rho\left(b, conv\, A\right)$. Рассмотрим следующую оптимизационную задачу:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n}\left(x_i-b_i\right)^2 \to \min, \\ \sum_{j=1}^{m}\alpha_j \cdot a_j = x, \\ \sum_{j=1}^{m}\alpha_i = 1, \\ \alpha_j \geqslant 0, \quad j \in [1,m]. \end{cases} \tag{17}$$

Тогда получаем, что искомое кратчайшее расстояние от точки b до выпуклой оболочки конечного множества A в пространстве $\mathbb{R}^n$ выражается формулой

$$\rho\left(b, conv\ A\right) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(x_i-b_i\right)^2}.$$

Алгоритм вычисления множества экстремальных точек и гиперграней конечного множества пространства $\mathbb{R}^n$ на основе двойственной связи с несовместными системами линейных неравенств

В работе [2] устанавливается двойственная связь между множеством точек $A=\left\{a_1,\ldots,a_m\right\}$ ранга n в пространстве $\mathbb{R}^n$ и несовместной системой из m линейных неравенств ранга $m-n-1$ такая, что гиперграням многогранника $conv\,A$ взаимно однозначно соответствуют минимальные несовместные подсистемы такой несовместной системы линейных неравенств. В данной работе мы используем этот результат для построения алгоритма поиска гиперграней заданного многогранника. Приведем определение преобразование Гейла.

Пусть дана конечная последовательность точек $X=\left(x_1,x_2,\ldots,x_m\right)\subset\mathbb{R}^n$ такая, что $aff\ X=\mathbb{R}^n$. Рассмотрим $(m-n-1)$-мерное пространство $K\left(X\right)$ всех решений $\left(\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_m\right)\in\mathbb{R}^m$ следующей однородной системы линейных уравнений

$$\sum_{i\in[1,m]}\beta_i\cdot x_i=0,\ \sum_{i\in[1,m]}\beta_i=0,$$

и зафиксируем в пространстве $K(X)$ произвольный упорядоченный базис

$$(b_1,b_2,\ldots,b_{m-n-1}).$$

Пусть $B(X)$ – $(m-n-1)\times m$-матрица, строками которой служат векторы $b_1,b_2,\ldots,b_{m-n-1}$ этого базиса. Для каждого индекса $i\in[1,m]$ обозначим через x_i^* – i-й столбец матрицы $B(X)$, рассматриваемый как вектор в пространстве $\mathbb{R}^{m-n-1}$.

Определение 2. Последовательность $X^*=(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_m^*)$ называется преобразованием Гейла последовательности X.

В работе [3] показано, что если заданы последовательность попарно различных точек $A=(a_1,a_2,\ldots,a_m)\subset\mathbb{R}^n$, и последовательность $B=(b_1,b_2,\ldots,b_m)\subset\mathbb{R}^{m-n-1}$, где $b_i=\alpha_i\cdot a_i^*$, $i\in[1,m]$, и $(a_1^*,a_2^*,\ldots,a_m^*)$ – преобразование Гейла последовательности A, то верны следующие утверждения:

(i) семейство подмножеств $\mathbf{I}$ множества $[1,m]$ является семейством мультииндексов минимальных несовместных подсистем системы

$$S(A)=\{\langle b_i,x\rangle>0:b_i,x\in\mathbb{R}^{m-n-1},i\in[1,m]\}\qquad(**)$$

тогда и только тогда, когда семейство $\mathfrak{I}^\perp=\{[1,m],\ \ I:I\in\mathbf{I}\}$ является семейством гиперграней $conv\ A$,

(ii) семейство $\mathbf{J}$ подмножеств множества $[1,m]$ является семейством мультииндексов всех максимальных совместных подсистем системы (**) тогда и только тогда, когда семейство $\mathbf{J}^{\perp} = \{[1,m], \ J : J \in \mathbf{J}\}$ является семейством мультииндексов всех диагоналей $conv\, A$.

Представленная двойственная связь (i)-(ii) позволяет предложить алгоритм построения экстремальных точек и множества всех гиперграней многогранника $conv\, A$. С этой целью для множества A необходимо построить систему линейных неравенств $S(A)$ вида (**), и далее с помощью метода свертывания С. Н. Черникова выделить все минимальные несовместные подсистемы полученной системы (**).

Проиллюстрируем предлагаемый алгоритм на примере.

Пример 1. Пусть задано множество точек $A = \{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\} \subset \mathbb{R}^2$, где $a_1 = (0,1)$, $a_2 = (1,1)$, $a_3 = (1,0)$, $a_4 = (0.5, 0.5)$, $a_5 = (0.75, 0.75)$.

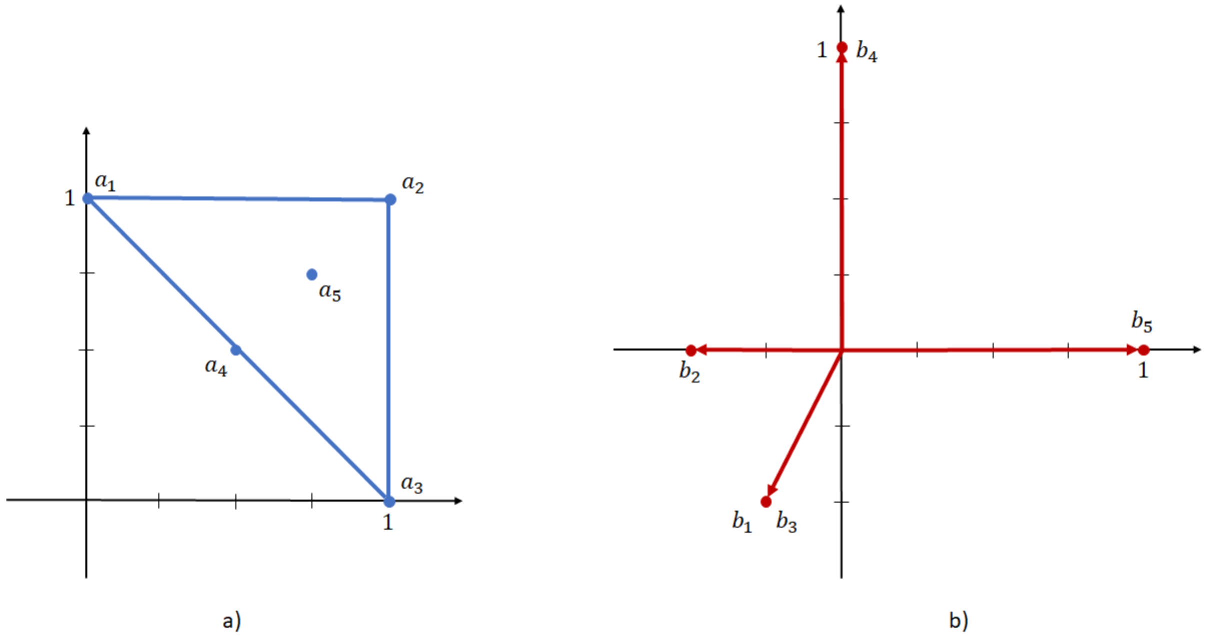


Рис. 2: Преобразование Гейла

Для построения преобразования Гейла последовательности точек $\{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\}$ составим систему уравнений

$$\begin{cases} x_1 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + x_2 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + x_3 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_4 \cdot \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} + x_5 \cdot \begin{pmatrix} 0.75 \\ 0.75 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = 0 \end{cases} \tag{1*}$$

Система $(*)$ имеет ранг $m-n-1=5-2-1=2$ и имеет, например, два независимых решения:

$$\left(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\right) = \left(-0.25, -0.5, -0.25, 0, 1\right),$$
$$\left(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\right) = \left(-0.5, -0, -0.5, 1, 0\right).$$

Составим матрицу из полученных векторов

$$K(X) = \begin{pmatrix} -0.25 & -0.5 & -0.25 & 0 & 1 \\ -0.5 & 0 & -0.5 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

столбцы которой составляют векторы $\left(b_1, b_2, b_3, b_4, b_5\right)$, являющиеся преобразованием Гейла последовательности $\left(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\right)$.

Далее составим систему неравенств $S(A)$ вида$(**)$.

$$\begin{cases} -0.25 \cdot y_1 - 0.5 \cdot y_2 > 0 & (1) \\ -0.5 \cdot y_1 + 0 \cdot y_2 > 0 & (2) \\ -0.25 \cdot y_1 - 0.5 \cdot y_2 > 0 & (3) \\ 0 \cdot y_1 + 1 \cdot y_2 > 0 & (4) \\ 1 \cdot y_1 + 0 \cdot y_2 > 0 & (5) \end{cases} \tag{2*}$$

Справа от каждого неравенства указан его номер, который будет принимать участие при выполнении процедур свертывания системы (2*) согласно алгоритму С. Н. Черникова.

На первом шаге производим свертывание по переменной y_1, для чего каждое неравенство с отрицательным коэффициентом при переменной y_1 сворачиваем с каждым неравенством с положительным коэффициентом при переменной y_1 так, что при этом в свернутом неравенстве переменная y_1 исчезает, а само неравенство получает индекс, объединяющий индексы сворачиваемых неравенств. При этом неравенство с нулевым коэффициентом при переменной y_1 считается уже свернутым и его индекс остается неизменным. Результат свертки системы (2*) по переменной y_1 представлен ниже.

$$\begin{cases} -2\cdot y_2>0 \quad (1,5) \\ 0\cdot y_2>0 \quad (2,5) \\ -2\cdot y_2>0 \quad (3,5) \\ 1\cdot y_2>0 \quad (4) \end{cases} \tag{3*}$$

Повторяя процедуру свертки для переменной y_2, получим следующую систему неравенств.

$$\begin{cases} 0>0 \quad (2,5) \\ 0>0 \quad (1,5,4) \\ 0>0 \quad (3,4,5) \end{cases} \tag{4*}$$

Таким образом, система (4*) является результатом свертки системы (2*).

Черниковым С. Н. доказано, что в результате процедуры свертки системы вида (2*) мы получим результат в виде системы (4*), которая предоставляет нам все минимальные несовместные подсистемы системы (2*), т. е. семейство индексов минимальных несовместных подсистем системы (2*) содержит 3 элемента:

$$I_1=\{2,5\},\, I_2=\{1,5,4\},\, I_3=\{3,4,5\}.$$

Согласно описанной выше теореме о двойственной связи между гипергранями многогранника A и минимальными несовместными подсистемами системы (2*) [2] получаем, что семейство индексов гиперграней A будет иметь вид:

$$H_1 = \{1,3,4\},\ H_2 = \{2,3\},\ H_3 = \{1,2\}.$$

Таким образом, в результате предлагаемого алгоритма мы получили, что множество точек из A, образующих все гиперграни $conv\,A$, имеет следующий вид

$$A_1 = \{a_1, a_3, a_4\},\ A_2 = \{a_2, a_3\},\ A_3 = \{a_1, a_2\}.$$

Заметим, что все точки из A, не вошедшие ни в одну гипергрань $conv\,A$, являются внутренними для $conv\,A$. Такой точкой в данном примере является точка $a_5 \in A$, $(A_1 \cup A_2 \cup A_3)$.

Теперь мы можем описать выпуклую оболочку множества A в виде пересечения замкнутых полупространств, т. е. в виде системы неравенств, каждое неравенство в которой однозначно определяется соответствующей гипергранью.

$$\begin{cases} x_2 \leq 1 \\ x_1 \leq 1 \\ x_1 + x_2 \geq 1 \end{cases} \qquad (5^*)$$

Представление выпуклой оболочки $conv\,A$ в виде системы неравенств (5*) удобно тем, что для проверки условия $x \in conv\,A$ для произвольной точки $x \in \mathbb{R}^n$ достаточно проверить, является ли x решением системы (5*). Также нам будет удобно проверить условие пересечения нескольких выпуклых оболочек подмножеств $A_1, A_2, \ldots, A_k \subseteq A$ просто проверив совместность системы неравенств, полученной объединением систем неравенств вида (5*), построенных для каждого из множеств $A_1, A_2, \ldots, A_k$.

Как мы видели выше, представление выпуклой оболочки $conv\,A$ в виде выпуклой оболочки экстремальных точек $conv\,A$ также может представлять интерес при реализации алгоритма решения задачи многоклассового распознавания образов. В связи с этим заметим, что с помощью алгоритма, обсуждаемого в данном разделе, могут быть найдены гиперграни множества $conv\,A$, для которых не все точки являются экстремальными. Так, например, в гиперграни, образованной точками из $\{a_1, a_3, a_4\}$, точка a_4 не является экстремальной. Таким образом, справедливо следующее утверждение.

Утверждение 2. Если с помощью алгоритма, обсуждаемого в данном разделе, получена гипергрань A' множества $conv\,A$, в которой содержится ровно n точек из A, то все эти точки из A' являются экстремальными точками множества $conv\,A$.

Доказательство. Доказательство легко следует из того факта, что если некоторая точка $a_i \in A'$ не является экстремальной, то $H = conv\,A' = conv\left(A' \setminus \{a_i\}\right)$, т. е. гипергрань H является выпуклой оболочкой $n-1$ точек. Но тогда гипергрань H имеет размерность „ $n-2$, что противоречит тому, что $aff\ A = \mathbb{R}^n$ и $conv\,A'$ – гипергрань размерности $n-1$ множества $conv\,A$.

□

Если для гиперграни H, образованной точками из $A' \subset A$, имеем $\left|A'\right| > n$, то Утверждение 2 не будет справедливым. Тогда для определения экстремальных точек, содержащихся в A', можно применить последовательно к множеству A' алгоритм, обсуждаемый в данном разделе. При этом ясно, что A' имеет афинную размерность на 1 меньшую, чем A, т. е.

$$dim\,aff\,(A') = dim\,aff\,(A) - 1.$$

Утверждение 3. Применяя описанный в данном разделе алгоритм поиска всех гиперграней множества $conv\,A$ последовательно для всех гиперграней, в которых число образующих точек больше, чем афинная размерность этой гиперграней, можно получить все экстремальные точки множества $conv\,A$.

Доказательство. Действительно, последовательное продолжение процесса влечет снижение размерности гиперграни на 1 на каждом шаге. Таким образом, на некотором шаге размерность гиперграни достигнет 0, т. е. будет построена гипергрань, состоящая из единственной точки, которая, согласно Утверждению 2, является экстремальной для своей гиперграни.

Завершает доказательство применение известного факта о том, что для грани любой размерности выпуклого многогранника ее экстремальные точки являются также экстремальными точками самого этого многогранника. □

Практическое использование

Рассматриваемый в данной статье подход возник в результате решения практических задач банковского скоринга [9], анализа финансовых рынков [10, 11], медицинской диагностики, не разрушающего контроля и поиска эталонных клиентов для проведения маркетинговых мероприятий в социальных сетях.

Продемонстрируем его применение на классической задаче Ирисы Фишера. Так как задача является классической, то подробно ее описывать не будем. Данные были взяты из [16].

Имеется обучающая выборка из 150 объектов в пространстве $\mathbb{R}^n$, которая разделена на 3 класса: класс A_1 – Setosa, класс A_2 – Versicolor и класс A_3 – Virginica, каждый из которых содержит по 50 объектов. Оказывается, что эта известная классическая задача является ВОМ-разрешимой, а именно:

$$\begin{cases} conv\ A_1 \cap \left(A_2 \cup A_3\right) = \varnothing, \\ conv\ A_2 \cap A_3 = \varnothing. \end{cases}$$

При этом решающее правило $class(x)$ выглядит следующим образом:

$$class(x) = \begin{cases} 1, \text{ если } x \in conv\ A_1, \\ 2, \text{ если } x \in conv\ A_2, \\ 3, \text{ если } x \in conv\ A_3. \end{cases}$$

$$arg \min_{i \in \{1,2,3\}} \rho\left(x, conv\ A_i\right), \text{ если } x \notin conv\ A_1 \cup conv\ A_2 \cup conv\ A_3.$$

Естественно, практические ситуации намного сложнее, но описанная выше последовательность действий приводит к однозначному классифицирующему правилу.

Отметим, что одним из достоинств предлагаемого подхода является его полная декомпозируемость при нахождении экстремальных точек. Т. е., разбивая исходное множество на произвольное количество частей, можно получить экстремальные точки для каждой части, после чего следует объединить найденные экстремальные точки в новое множество и повторить процедуру. В свою очередь эффективные методы построения выпуклых оболочек множеств конечномерного пространства представляют самостоятельный интерес и выступают объектом дальнейших исследований.

Заключение

В работе исследуется задача распознавания образов в геометрической многоклассовой постановке. Такие задачи часто возникают в области финансовой математики, например, в задачах банковского скоринга и анализа рынков, а также в различных областях диагностики и прогнозирования.

С теоретической точки зрения геометрическая постановка задачи многоклассового распознавания образов открывает целый ряд возможностей для исследования структурных и комбинаторных свойств ожидаемых решений. Так, в частности, в работе развит подход, основанный на свойствах отделимости выпуклых оболочек множеств конечномерного пространства.

Собственно задача многоклассового распознавания образов в геометрической постановке заключается в построении решающего правила для отнесения произвольного входного вектора $x \in \mathbb{R}^n$ к одному из m классов обучающей выборки. Основная идея предлагаемого подхода к решению такой задачи может быть охарактеризована следующим образом. Для каждого класса обучающей выборки (множества точек конечномерного пространства) необходимо построить выпуклую оболочку. Тогда отнесение вектора x к одному из классов сводится к вычислению расстояния от него до соответствующей выпуклой оболочки. При этом показано, что если заданные классы обучающей выборки не пересекаются (по точкам), то предлагаемый подход влечет единственность и однозначность решающего правила. В общем же случае требуется, чтобы выпуклая оболочка каждого класса не содержала в себе точек из других классов. Задачи, обучающие выборки которых удовлетворяют этому условию, были названы в работе ВОМ-разрешимыми.

Результаты вычислительных экспериментов с использованием предлагаемого подход продемонстрировали нетривиальный факт – ряд классических задач распознавания образов в геометрической постановке являются ВОМ-разрешимыми. Это обстоятельство позволяет ожидать высокую эффективность метода с прикладной точки зрения.

Наиболее трудоемким этапом реализации предлагаемого подхода является построение выпуклых оболочек множеств точек, соответствующих классам обучающей выборки. Для этих целей в работе был использован вспомогательный аппарат преобразования Гейла последовательности точек конечномерного пространства и метод свертки С. Н. Черникова для поиска минимальных несовместных подсистем несовместной системы линейных неравенств. В основе этих вспомогательных рассуждений лежит ранее установленная двойственная взаимосвязь между семействами гиперграней выпуклого многогранника и семейством мультииндексов минимальных несовместных подсистем несовместной системы линейных неравенств. Соответствующая процедура изложена в работе в рамках академического примера небольшой размерности.

Следует также отметить, что формализация класса ВОМ-разрешимых задач многоклассового распознавания образов, а также дальнейшее развитие методов построения ВО множества точек конечномерного пространства, представляют собой объекты дальнейших исследований и выходят за рамки представленной работы.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки № 9.7555.2017/БЧ»

Библиографический список

1. Бельский А.Б., Чобан В.М. Математическое моделирование и алгоритмы распознавания целей на изображениях, формируемых прицельными системами летательного аппарата // Труды МАИ. 2013. № 66. URL: http://trudymai.ru/published.php?ID=40856

2. Гайнанов Д.Н. Комбинаторная геометрия и графы в анализе несовместных систем и распознавании образов. - М.: Наука, 2014. - 173 с.

3. Гейл Д. Теория линейных экономических моделей. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1963. - 418 с.

4. Голдовский А.А. Численные модели прогнозирования контактных зон в результате ударного взаимодействия авиационных конструкций с преградой при аварийных ситуациях // Труды МАИ. 2019. № 107. URL: http://trudymai.ru/published.php?ID=107919

5. Даниленко А.Н. Разработка методов и алгоритмов интеллектуальной поддержки принятия решений в системах управления кадрами // Труды МАИ. 2011. № 46. URL: http://trudymai.ru/published.php?ID=25997

6. Еремин И.И., Астафьев Н.Н. Введение в теорию линейного и выпуклого программирования. – М.: Наука, 1970. - 191 с.

7. Еремин И.И. Теория линейной оптимизации. – Екатеринбург: Изд-во Екатеринбург, 1999. - 312 с.

8. Журавель А.А., Трошко Н.В., Эджубов Л.Г. Использование алгоритма обобщенного портрета для опознавания образов в судебном почерковедении. Правовая кибернетика. - М.: Наука, 1970. С. 212 – 227.

9. Закиров Р.Г. Прогнозирование технического состояния бортового радиоэлектронного оборудования // Труды МАИ. 2015. № 85. URL: http://trudymai.ru/published.php?ID=67515

10. Мазуров В.Д. Метод комитетов в задачах оптимизации и классификации. - М.: Наука, 1990. - 248 с.

11. Мазуров В.Д. Линейная оптимизация и моделирование. – Свердловск: УрГУ, 1986. – 68 с.

12. Никонов О.И., Чернавин Ф.П. Построение рейтинговых групп заемщиков физических лиц с применением метода комитетов // Деньги и Кредит. 2014. № 11. С. 52 – 55.

13. Сырин С.А., Терещенко Т.С., Шемяков А.О. Анализ прогнозов научно-технологического развития России, США, Китая и Европейского Союза как лидеров мировой ракетно-космической промышленности // Труды МАИ. 2015. № 82. URL: http://trudymai.ru/published.php?ID=58745

14. Флах П. Машинное обучение. Наука и искусство построения алгоритмов, которые извлекают знания из данных. - М.: ДМК Пресс, 2015. - 400 с.

15. Чернавин Н.П., Чернавин Ф.П. Применение метода комитетов к прогнозированию движения фондовых индексов // Международная научная конференция «Наука молодых»: сборник материалов (Москва, 19-20 ноября 2015). - М.: Изд-во Русальянс «Сова», 2015. С. 307 - 320.

16. Чернавин Н.П., Чернавин Ф.П. Применение метода комитетов в техническом анализе инструментов финансовых рынков // Современные научные исследования в сфере экономики: сборник результатов научных исследований. – Киров: Межрегиональный центр инновационных технологий в образовании, 2018. С. 1052 – 1062.

17. Черников С.И. Линейные неравенства. – М.: Наука, 1970. - 191 с.

18. Diego Fernandes-Francos, Jscar Fontela-Romero, Amparo Alonso-Betanzos. One-class classification algorithm based on convex hull // European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning, 2016, available at: https://www.elen.ucl.ac.be/Proceedings/esann/esannpdf/es2016-136.pdf

19. Gainanov D. N., Mladenovic N., Berenov. D. Dichotomy algorithms in the multi-class problem of pattern recognition // Advances in Operational Research in the Balkans, 2019, pp. 3 - 14. doi: https://doi.org/10.1007/978-3-030-21990-1_1

20. Pardalos P.M., Li Y., Hager. W.W. Linear Programming Approaches to the Convex Hull Problem in R^m // Computers Mathematics Applications, 1995, vol. 29, no. 7, pp. 23 – 29.

21. Zhenbing Liu, JG Liu, Chao Pan, Guoyou Wang. A novel geometric approach to binary classification based on scaled convex hulls // Neural Networks, IEEE Transactions on, 2009, no. 20 (7), pp. 1215 – 1220.

22. Uci machine learning repository, available at: http://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris

23. Коэльо Л.П., Ричард В. Построение систем машинного обучения на языке Python. - М.: ДМК Пресс, 2016. - 302 с.