Линейные методы восстановления зависимостей по эмпирическим данным

В.В. Моттль

Вычислительный центр РАН
Московский физико-технический институт

О.С. Середин

Тульский государственный университет

Типовая задача восстановления закономерностей в множествах объектов реального мира

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

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

Объективно существующая скрытая функция $y(\omega): \Omega \to Y$.

Желание наблюдателя:

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

Обучение по прецедентам:

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

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

Типовая задача восстановления закономерностей в множествах объектов реального мира

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

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

Объективно существующая скрытая функция $y(\omega): \Omega \to Y$.

Желание наблюдателя:

Иметь инструмент оценивания скрытой характеристики для реальных объектов

$\hat{y}(\omega): \Omega \to Y$; $\hat{y}(\omega) \neq y(\omega)$ – ошибка.

Простейшие случаи:

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

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

Концептуальная база восстановления зависимостей: гипотеза компактности

Множество объектов реального мира $\omega \in \Omega$

Скрытая характеристика объекта (целевая характеристика) $y(\omega): \Omega \to Y$

Искомое решающее правило $\hat{y}(\omega): \Omega \to Y$

Основная идея:

Выбрать в множестве объектов некоторую метрику

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

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

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

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

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

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

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

Диполь в метрическом пространстве

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

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

Простейшая реализация гипотезы компактности

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

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

Как выбрать диполь?

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

Более «тонкая» реализация гипотезы компактности для непрерывного метрического пространства

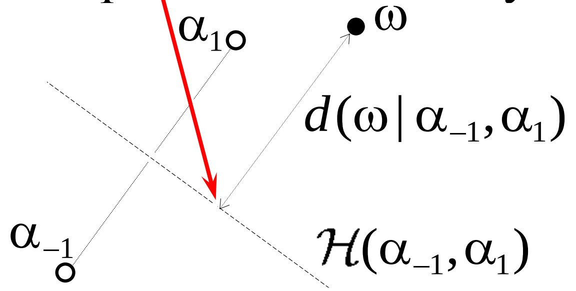
$\tilde{\Omega} \supset \Omega$ – воображаемое непрерывное метрическое пространство, в котором множество реальных объектов является подмножеством, быть может, изолированных элементов.

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

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

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

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



Классификация:

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

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

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

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

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

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

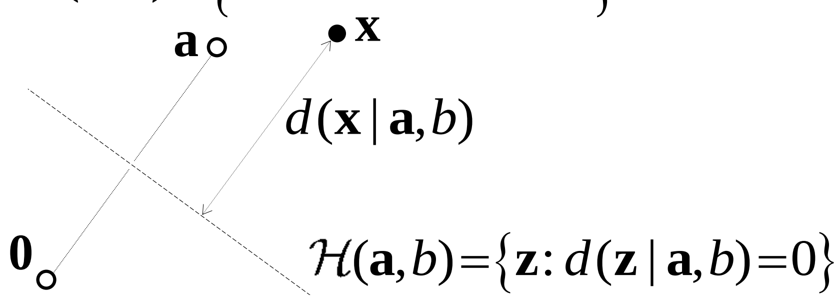
Диполь: $\alpha_1=\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n$, $\alpha_{-1}=\mathbf{0}\in\mathbb{R}^n$; $\mathbf{a}$ – направляющий вектор гиперплоскости

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

Решающая функция – decision (score) function:

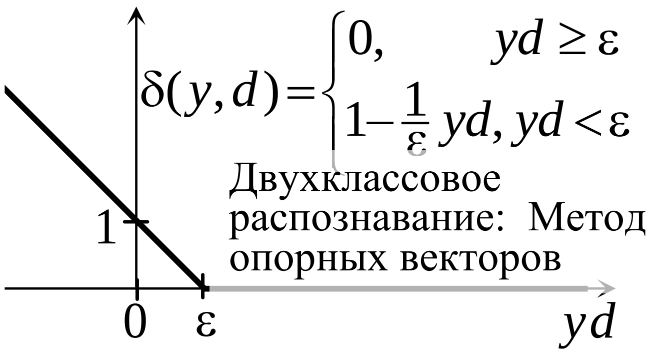
Расстояние от точки $\mathbf{x}(\omega)\in\mathbb{R}^n$ до гиперплоскости

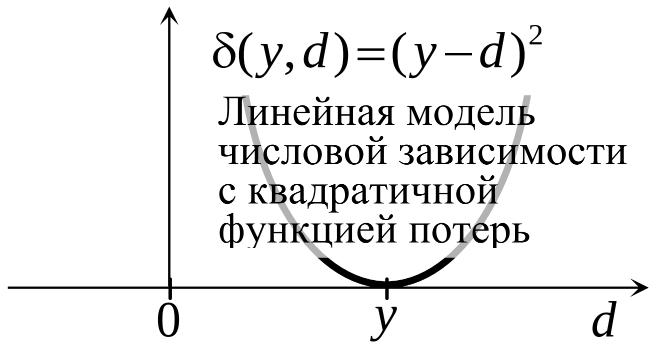
$$d(\mathbf{x}\,|\,\mathbf{a},b)=\frac{\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b}{(\mathbf{a}^T\mathbf{a})^{1/2}},\quad d(\mathbf{x}\,|\,\mathbf{a},b)=\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b \text{ при } \|\mathbf{a}\|=1$$



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

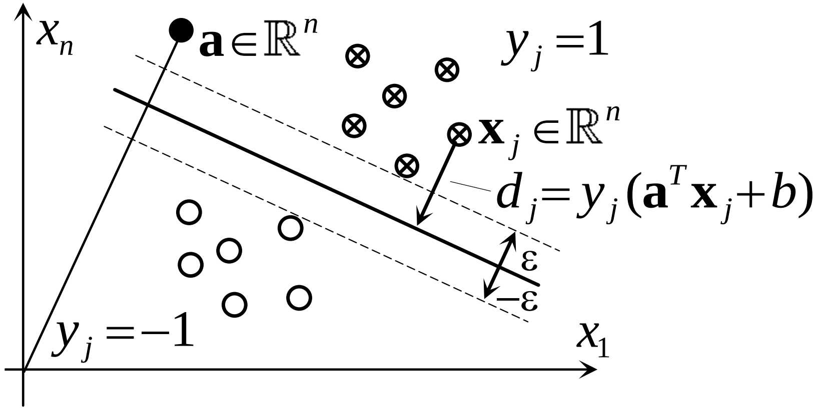
Индекс класса объекта $y\in\{-1,1\}$ Числовая характеристика $y\in\mathbb{R}$





Метод опорных векторов (Support Vector Machine – SVM): Принцип максимального зазора (margin) между классами

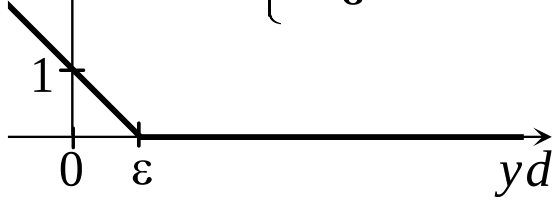
Обучающая совокупность $\left\{(\mathbf{x}_j, y_j),\ j=1,\dots,N\right\},\quad \mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^n,\ \ y_j \in \{-1, 1\}$

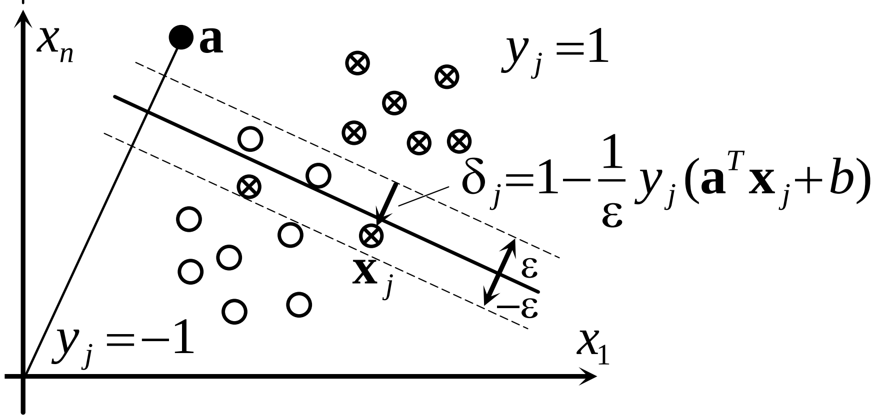


Требование максимизации зазора между линейно разделимыми классами

$$\begin{cases} 1/\varepsilon^2 \to \min(\varepsilon, \mathbf{a}, b) \\ \mathbf{a}^T\mathbf{a} = 1 \end{cases}$$

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





Требование минимизации суммы штрафов

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N} \delta_j \to \min(\varepsilon, \mathbf{a}, b, \delta_1, \dots, \delta_N),\ \ \mathbf{a}^T\mathbf{a} = 1 \\ y_j(\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j + b) \ge \varepsilon(1 - \delta_j),\ \delta_j \ge 0,\ j = 1,\dots,N \end{cases}$$

Компромисс:

$$\begin{cases} 1/\varepsilon^2 + C\sum_{j=1}^{N} \delta_j \to \min(\varepsilon, \mathbf{a}, b, \delta_1, \dots, \delta_N),\ \ \mathbf{a}^T\mathbf{a} = 1 \\ y_j(\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j + b) \ge \varepsilon(1 - \delta_j),\ \delta_j \ge 0,\ j = 1,\dots,N \end{cases}$$

Оптимизация на сфере $\mathbf{a}^T\mathbf{a} = 1$:
Невыпуклый критерий обучения

Метод опорных векторов: Выпуклая форма критерия

Невыпуклый критерий

$$\begin{cases} 1/\varepsilon^2 + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\varepsilon, \mathbf{a}, b, \delta_1, ..., \delta_N),\ \mathbf{a}^T\mathbf{a} = 1, \\ y_j(\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j + b) \geq \varepsilon(1-\delta_j),\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, ..., N. \end{cases}$$

Замена переменных

$$\mathbf{a} = \varepsilon\tilde{\mathbf{a}},\ \ b = \varepsilon\tilde{b}, \qquad \text{тогда } \tilde{\mathbf{a}}^T\tilde{\mathbf{a}} = 1/\varepsilon^2$$

Результат замены:

$$\begin{cases} 1/\varepsilon^2 + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\varepsilon, \tilde{\mathbf{a}}, \tilde{b}, \delta_1, ..., \delta_N),\ \tilde{\mathbf{a}}^T\tilde{\mathbf{a}} = 1/\varepsilon^2, \\ y_j(\tilde{\mathbf{a}}^T\mathbf{x}_j + \tilde{b}) \geq 1-\delta_j,\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, ..., N. \end{cases}$$

Выпуклый критерий обучения:
Задача квадратичного программирования
$N+n+1$ переменных, $2N$ ограничений

$$\boxed{\begin{cases} \mathbf{a}^T\mathbf{a} + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n, b\in\mathbb{R}, \delta_1, ..., \delta_N \in\mathbb{R}), \\ y_j(\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j + b) \geq 1-\delta_j,\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, ..., N. \end{cases}}$$

Метод опорных векторов: Выпуклая форма критерия

Выпуклый критерий обучения:
Задача квадратичного программирования
$N+n+1$ переменных, $2N$ ограничений

$$\begin{cases} \mathbf{a}^T\mathbf{a} + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n, b\in\mathbb{R}, \delta_1,...,\delta_N\in\mathbb{R}), \\ y_j(\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j + b)\geq 1-\delta_j,\ \delta_j\geq 0,\ j=1,...,N. \end{cases}$$

Двойственная форма задачи:
Задача квадратичного программирования
Переменные $\{\lambda_1,...,\lambda_N\}$ соответствуют
обучающим объектам $\{\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_N\}$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l)\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N} y_j\lambda_j = 0,\ 0\leq\lambda_j\leq C/2,\ j=1,...,N. \end{cases}$$

$$\mathbf{a} = \sum_{j:\lambda_j>0} y_j\lambda_j\mathbf{x}_j,\ b = -\frac{\sum_{j:0<\lambda_j<C/2}\lambda_j\sum_{l:\lambda_l>0} y_l\lambda_l(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l) + (C/2)\sum_{j:\lambda_j=C/2} y_j}{\sum_{j:0<\lambda_j<C/2}\lambda_j},\ \delta_j = \begin{cases} 0, \lambda_j < C/2 \\ \delta_j > 0, \lambda_j = C/2 \end{cases}$$

опорные векторы

Правило классификации нового объекта $d(\mathbf{x}) = \dfrac{\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}} \gtrless 0$

Эквивалентная запись $d(\mathbf{x}) = \dfrac{\sum_{j:\lambda_j>0} y_j\lambda_j(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}) + b}{\sum_{k:\lambda_k>0}\sum_{l:\lambda_l>0} y_k y_l(\mathbf{x}_k^T\mathbf{x}_l)\lambda_k\lambda_l} = \sum_{j:\lambda_j>0} c_j(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}) + g \gtrless 0$

Метод опорных векторов: Выпуклая форма критерия

Выпуклый критерий обучения:
Задача квадратичного программирования
$N+n+1$ переменных, $2N$ ограничений

$$\begin{cases} \mathbf{a}^T\mathbf{a} + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n, b\in\mathbb{R}, \delta_1,\dots,\delta_N\in\mathbb{R}), \\ y_j(\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j + b) \ge 1-\delta_j,\ \delta_j\ge 0,\ j=1,\dots,N. \end{cases}$$

Двойственная форма задачи:
Задача квадратичного программирования
Переменные $\{\lambda_1,\dots,\lambda_N\}$ соответствуют
обучающим объектам $\{\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_N\}$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l (\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l)\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N} y_j\lambda_j = 0,\ \ 0\le\lambda_j\le C/2,\ \ j=1,\dots,N. \end{cases}$$

$$\mathbf{a} = \sum_{j:\lambda_j>0} y_j\lambda_j\mathbf{x}_j,\ \ b = -\frac{\sum_{j:0<\lambda_j<C/2}\lambda_j\sum_{l:\lambda_l>0} y_l\lambda_l(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l) + (C/2)\sum_{j:\lambda_j=C/2} y_j}{\sum_{j:0<\lambda_j<C/2}\lambda_j},\ \ \delta_j = \begin{cases} 0, & \lambda_j < C/2 \\ \delta_j>0, & \lambda_j = C/2 \end{cases}$$

опорные векторы

Правило классификации нового объекта $d(\mathbf{x}) = \dfrac{\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}} \gtrless 0$

Эквивалентная запись $d(\mathbf{x}) = \dfrac{\sum_{j:\lambda_j>0} y_j\lambda_j(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}) + b}{\sum_{k:\lambda_k>0}\sum_{l:\lambda_l>0} y_k y_l(\mathbf{x}_k^T\mathbf{x}_l)\lambda_k\lambda_l} = \sum_{j:\lambda_j>0} c_j(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}) + g \gtrless 0$

Метод опорных векторов: Выпуклая форма критерия

Выпуклый критерий обучения:
Задача квадратичного программирования
$N+n+1$ переменных, $2N$ ограничений

$$\begin{cases} \mathbf{a}^T\mathbf{a} + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n, b\in\mathbb{R}, \delta_1,\ldots,\delta_N\in\mathbb{R}), \\ y_j(\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j + b)\geq 1-\delta_j,\ \delta_j\geq 0,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$$

Двойственная форма задачи:
Задача квадратичного программирования
Переменные $\{\lambda_1,\ldots,\lambda_N\}$ соответствуют
обучающим объектам $\{\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_N\}$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l (\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l)\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N} y_j\lambda_j = 0,\ 0\leq\lambda_j\leq C/2,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$$

$$\mathbf{a} = \sum_{j:\lambda_j>0} y_j\lambda_j \underbrace{\mathbf{x}_j}_{\text{опорные векторы}},\ b = -\frac{\sum_{j:0<\lambda_j<C/2}\lambda_j\sum_{l:\lambda_l>0} y_l\lambda_l(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l) + (C/2)\sum_{j:\lambda_j=C/2} y_j}{\sum_{j:0<\lambda_j<C/2}\lambda_j},\ \delta_j = \begin{cases} 0, & \lambda_j < C/2 \\ \delta_j > 0, & \lambda_j = C/2 \end{cases}$$

Правило классификации нового объекта $d(\mathbf{x}) = \dfrac{\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}} \gtrless 0$

Эквивалентная запись $d(\mathbf{x}) = \dfrac{\sum_{j:\lambda_j>0} y_j\lambda_j(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}) + b}{\sum_{k:\lambda_k>0}\sum_{l:\lambda_l>0} y_k y_l(\mathbf{x}_k^T\mathbf{x}_l)\lambda_k\lambda_l} = \sum_{j:\lambda_j>0} c_j(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}) + g \gtrless 0$

Метод опорных векторов: Выпуклая форма критерия

Выпуклый критерий обучения:
Задача квадратичного программирования
$N+n+1$ переменных, $2N$ ограничений

$$\begin{cases} \mathbf{a}^T\mathbf{a} + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n, b\in\mathbb{R}, \delta_1,\dots,\delta_N\in\mathbb{R}), \\ y_j(\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j + b)\ge 1-\delta_j,\ \delta_j\ge 0,\ j=1,\dots,N. \end{cases}$$

Двойственная форма задачи:
Задача квадратичного программирования
Переменные $\{\lambda_1,\dots,\lambda_N\}$ соответствуют обучающим объектам $\{\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_N\}$

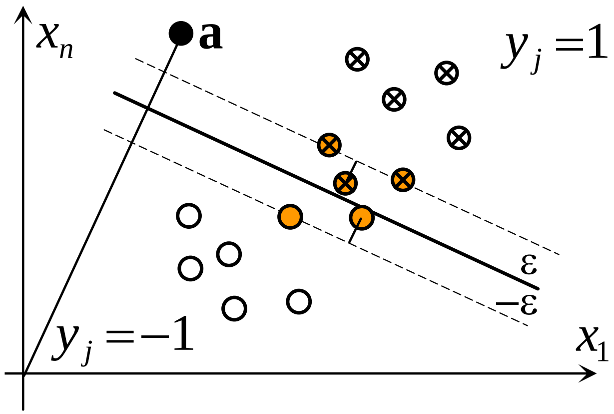
$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l)\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N} y_j\lambda_j = 0,\ \ 0\le\lambda_j\le C/2,\ \ j=1,\dots,N. \end{cases}$$

$$\mathbf{a} = \sum_{j:\lambda_j>0} y_j\lambda_j\mathbf{x}_j,\quad b = -\frac{\sum_{j:0<\lambda_j<C/2}\lambda_j\sum_{l:\lambda_l>0} y_l\lambda_l(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l) + (C/2)\sum_{j:\lambda_j=C/2} y_j}{\sum_{j:0<\lambda_j<C/2}\lambda_j},\quad \delta_j = \begin{cases} 0, & \lambda_j < C/2 \\ \delta_j>0, & \lambda_j = C/2 \end{cases}$$

опорные векторы

Правило классификации нового объекта $d(\mathbf{x}) = \dfrac{\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}} \gtrless 0$

Эквивалентная запись $d(\mathbf{x}) = \dfrac{\sum_{j:\lambda_j>0} y_j\lambda_j(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}) + b}{\sum_{k:\lambda_k>0}\sum_{l:\lambda_l>0} y_k y_l(\mathbf{x}_k^T\mathbf{x}_l)\lambda_k\lambda_l} = \sum_{j:\lambda_j>0} c_j(\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}) + g \gtrless 0$



Метод опорных векторов
Support Vector Machine (SVM)

Повтор: Диполь в метрическом пространстве

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

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

Простейшая реализация гипотезы компактности

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

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

Как выбрать диполь?

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

Более «тонкая» реализация гипотезы компактности для непрерывного метрического пространства

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

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

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

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

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

Погружение метрического пространства в линейное пространство

Соосность элементов метрического пространства

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

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

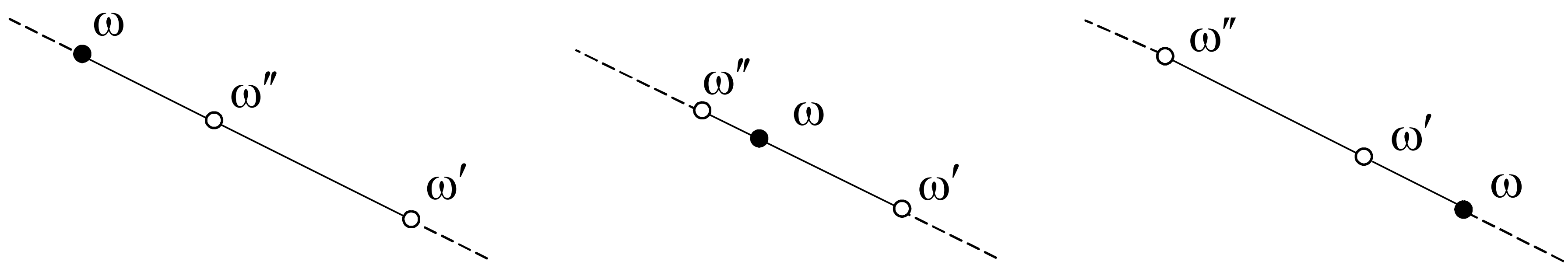
$\rho(\omega', \omega'') = \rho(\omega'', \omega')$;

$\rho(\omega', \omega'') + \rho(\omega'', \omega''') \geq \rho(\omega', \omega''')$ – неравенство треугольника (равенство для некоторых троек)

Упорядоченная пара элементов $< \omega', \omega'' > \in \Omega \times \Omega$, действительное число $c \in \mathbb{R}$.

Элемент, соосный паре $< \omega', \omega'' >$ с коэффициентом c

$$\omega = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >; c\right): \qquad \rho(\omega', \omega) = |c|\,\rho(\omega', \omega''), \;\; \rho(\omega'', \omega) = |c-1|\,\rho(\omega', \omega'')$$



$c > 1$ $\qquad$ $0 \leq c \leq 1$ $\qquad$ $c < 0$

Метрическое пространство Ω называется ординарным, если для каждой пары $< \omega', \omega'' > \in \Omega \times \Omega$ и коэффициента $c \in \mathbb{R}$ существует не более одного элемента $\omega = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >; c\right)$.

Неограниченно выпуклое метрическое пространство

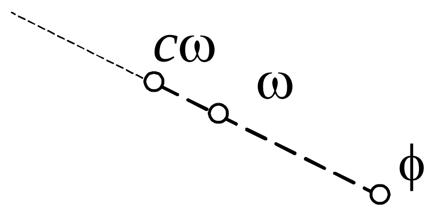
Метрическое пространство Ω называется неограниченно выпуклым, если для любой пары $<\omega', \omega''> \in \Omega \times \Omega$ и любого коэффициента $c \in \mathbb{R}$ в нем существует элемент $\omega = \mathrm{Coax}\left(<\omega', \omega''>; c\right)$.

Идея введения линейных операций в ординарном неограниченно выпуклом метрическом пространстве

Центр метрического пространства $\phi \in \Omega$.

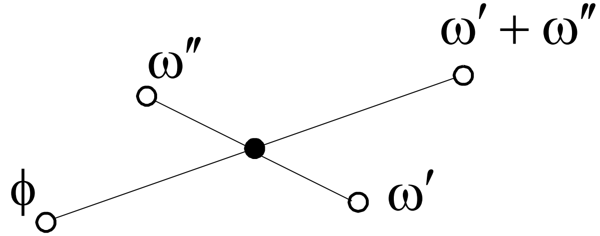
Умножение элемента $\omega \in \Omega$ на коэффициент

$$c\omega = \mathrm{Coax}\left(<\phi, \omega>; c\right)$$



Сложение элементов $\omega', \omega'' \in \Omega$

$$\omega' + \omega'' = 2\mathrm{Coax}(<\omega', \omega''>; 1/2)$$



Пример «наивной» реализации линейных операций над изображениями

Пара изображений лица человека

изображение $\mathbf{x}'$

$\mathbf{x}' = \left\{ x'_{\mathbf{s}'}, \mathbf{s}' \in \mathbf{T}' \right\}$

изображение $\mathbf{x}'$

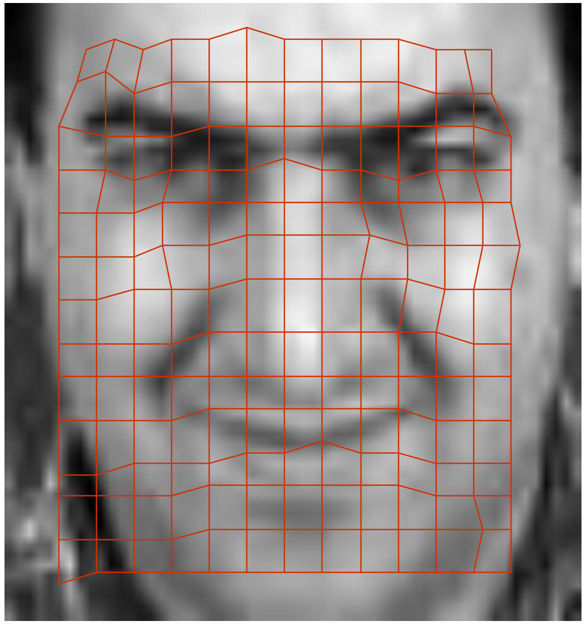
$\mathbf{x}'' = \left\{ x''_{\mathbf{s}''}, \mathbf{s}'' \in \mathbf{T}'' \right\}$

Пример «наивной» реализации линейных операций над изображениями

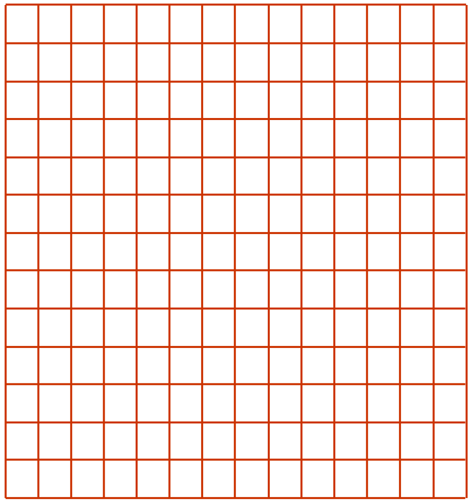
Пара изображений лица человека

изображение $\mathbf{x}'$

$\mathbf{x}' = \{x'_{\mathbf{s}'}, \mathbf{s}' \in \mathbf{T}'\}$

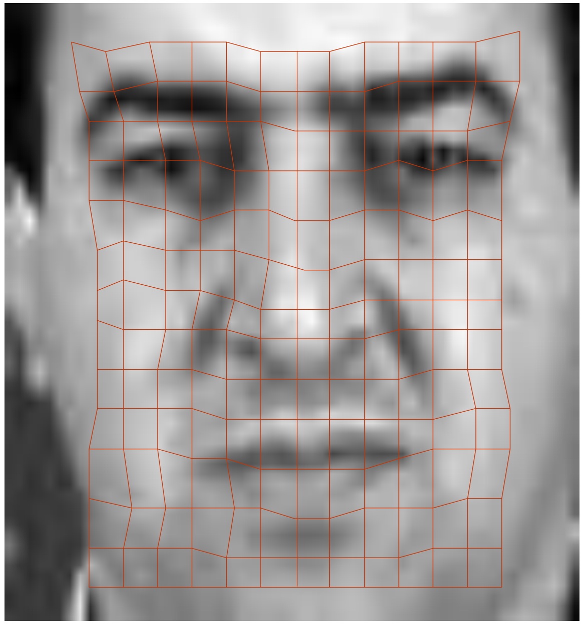


«среднее» изображение



изображение $\mathbf{x}'$

$\mathbf{x}'' = \{x''_{\mathbf{s}''}, \mathbf{s}'' \in \mathbf{T}''\}$



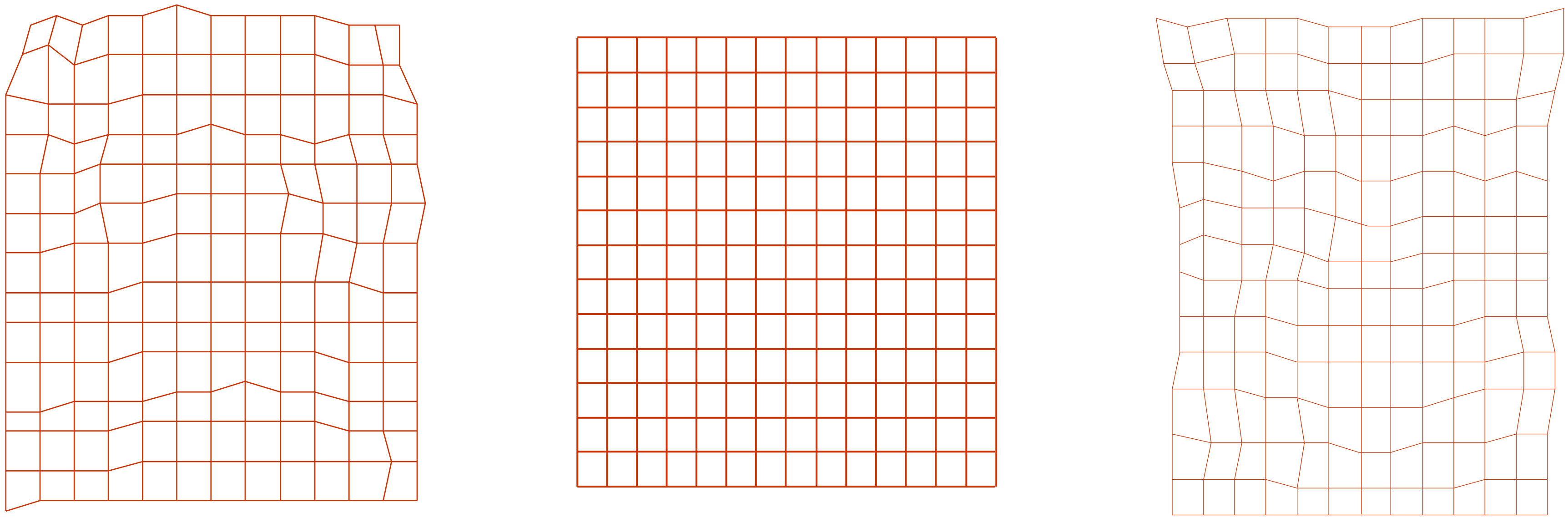
Пример «наивной» реализации линейных операций над изображениями

Пара изображений лица человека

изображение $\mathbf{x}'$ — $\mathbf{x}' = \left\{ x'_{\mathbf{s}'}, \mathbf{s}' \in \mathbf{T}' \right\}$

«среднее» изображение — $\mathbf{x} = \left\{ x_{\mathbf{t}}, \mathbf{t} \in \mathbf{T} \right\}$

изображение $\mathbf{x}'$ — $\mathbf{x}'' = \left\{ x''_{\mathbf{s}''}, \mathbf{s}'' \in \mathbf{T}'' \right\}$



$$\mathbf{s}'(\mathbf{t}) = \mathbf{t} + \mathbf{v}_{\mathbf{t}} / 2 \in \mathbf{T}' \quad \leftarrow \quad \mathbf{t} \in \mathbf{T} \quad \rightarrow \quad \mathbf{s}''(\mathbf{t}) = \mathbf{t} - \mathbf{v}_{\mathbf{t}} / 2 \in \mathbf{T}''$$

$$J(\mathbf{V} \mid \mathbf{x}', \mathbf{x}'') = \sum\nolimits_{\mathbf{t} \in \mathbf{T}} \left(x'_{\mathbf{t}+\mathbf{v}_{\mathbf{t}}/2} - x''_{\mathbf{t}-\mathbf{v}_{\mathbf{t}}/2} \right)^2 + \beta \sum\nolimits_{(\mathbf{t},\mathbf{u}) \in G} \| \mathbf{v}_{\mathbf{t}} - \mathbf{v}_{\mathbf{u}} \|^2 \rightarrow \min$$

Метрика: $\rho(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') = \left(\sum\nolimits_{\mathbf{t} \in \mathbf{T}} \left(x'_{\mathbf{t}+\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{t}}/2} - x''_{\mathbf{t}-\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{t}}/2} \right)^2 \right)^{1/2}$

Пример «наивной» реализации линейных операций над изображениями

Пара изображений лица человека

изображение $\mathbf{x}'$

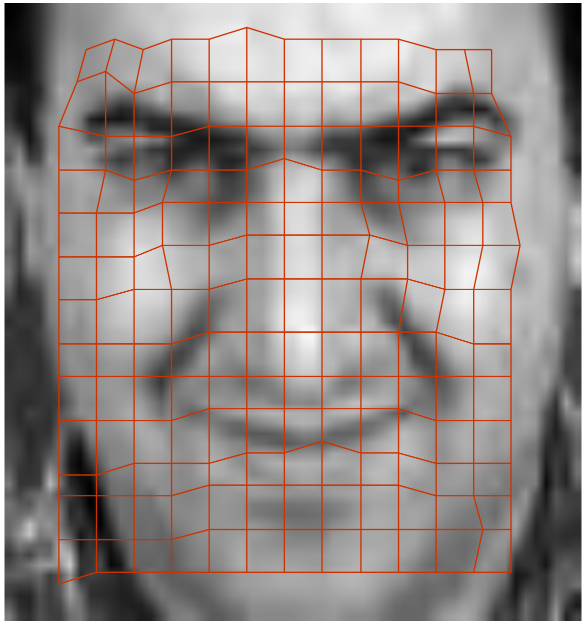
$\mathbf{x}' = \{x'_{\mathbf{s}'}, \mathbf{s}' \in \mathbf{T}'\}$

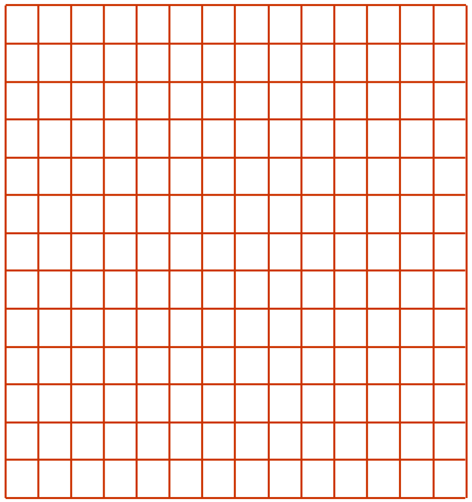
«среднее» изображение

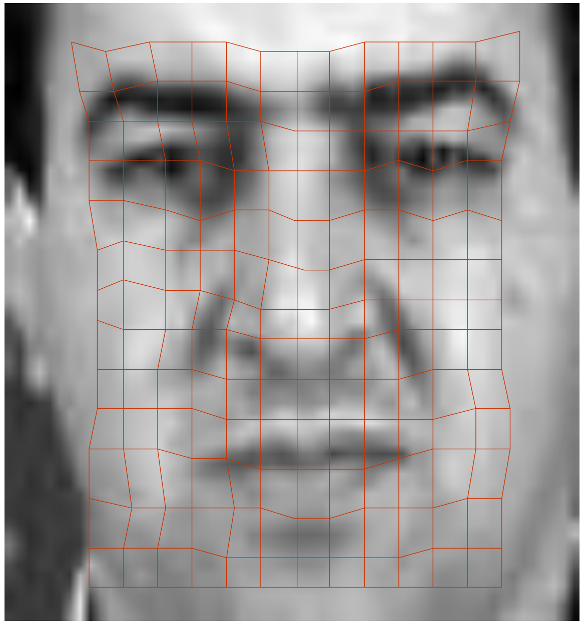
$\mathbf{x} = \{x_{\mathbf{t}}, \mathbf{t} \in \mathbf{T}\}$

изображение $\mathbf{x}'$

$\mathbf{x}'' = \{x''_{\mathbf{s}''}, \mathbf{s}'' \in \mathbf{T}''\}$







Оптимальная эластичная деформация растров пары изображений

Пример «наивной» реализации линейных операций над изображениями

Пара изображений лица человека

изображение $\mathbf{x}'$

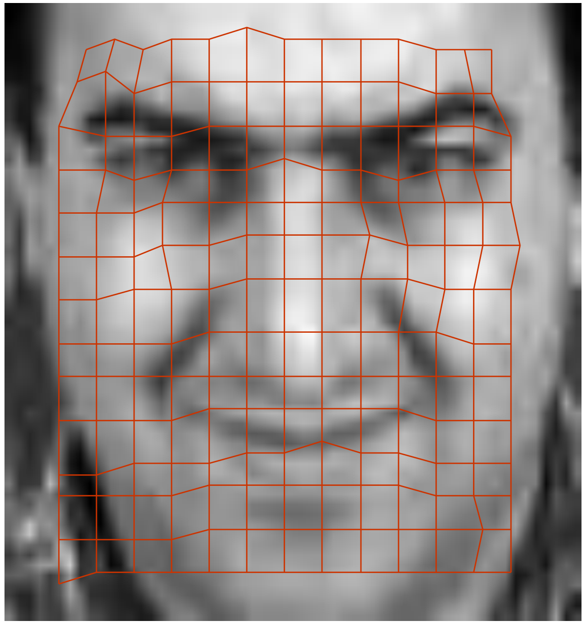
$$\mathbf{x}' = \{x'_{s'}, \mathbf{s}' \in \mathbf{T}'\}$$

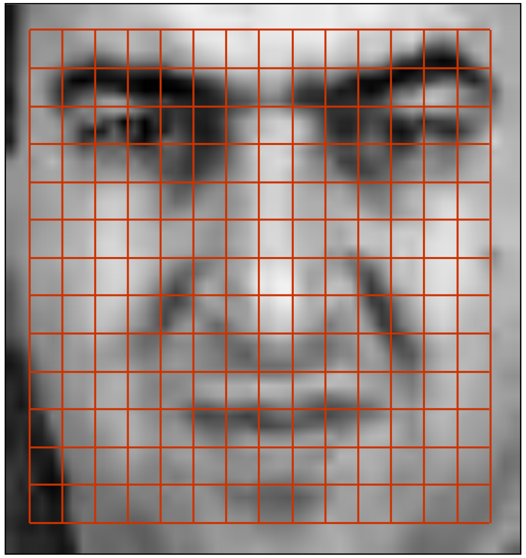
«среднее» изображение

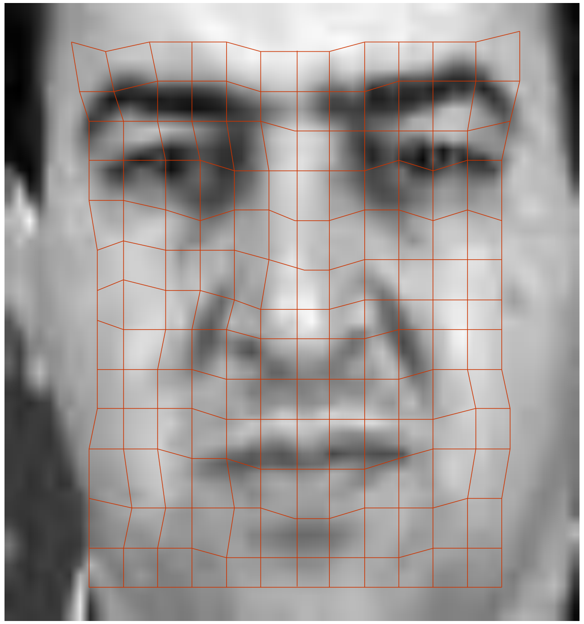
$$\mathbf{x} = \{x_{\mathbf{t}}, \mathbf{t} \in \mathbf{T}\}$$

изображение $\mathbf{x}'$

$$\mathbf{x}'' = \{x''_{s''}, \mathbf{s}'' \in \mathbf{T}''\}$$







Среднее арифметическое изображение

$$\mathbf{x} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}' + \mathbf{x}'')$$

Пример «наивной» реализации линейных операций над изображениями

Пара изображений лица человека

изображение $\mathbf{x}'$

$$\mathbf{x}' = \left\{ x'_{\mathbf{s}'}, \mathbf{s}' \in \mathbf{T}' \right\}$$

«среднее» изображение

$$\mathbf{x} = \left\{ x_{\mathbf{t}}, \mathbf{t} \in \mathbf{T} \right\}$$

изображение $\mathbf{x}'$

$$\mathbf{x}'' = \left\{ x''_{\mathbf{s}''}, \mathbf{s}'' \in \mathbf{T}'' \right\}$$

Среднее арифметическое изображение

$$\mathbf{x} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}' + \mathbf{x}'')$$

Требования, предъявляемые к линейным операциям

- сложение коммутативно $\omega' + \omega'' = \omega'' + \omega'$
  и ассоциативно $(\omega' + \omega'') + \omega''' = \omega' + (\omega'' + \omega''')$;
- существует нулевой элемент $\omega + \phi = \omega,\ c\phi = \phi$;
- для каждого элемента существует обратный ему элемент $(-\omega) + \omega = \phi$;
- умножение ассоциативно $c'(c''\omega) = (c'c'')\omega$;
- умножение на единицу оставляет элемент без изменения $1\omega = \omega$;
- сложение и умножение дистрибутивны $(c' + c'')\omega = c'\omega + c''\omega,\ c(\omega' + \omega'') = c\omega' + c\omega''$;

Требования, предъявляемые к линейным операциям

- сложение коммутативно $\omega' + \omega'' = \omega'' + \omega'$
  и ассоциативно $(\omega' + \omega'') + \omega''' = \omega' + (\omega'' + \omega''')$;
- существует нулевой элемент $\omega + \phi = \omega,\ c\phi = \phi$;
- для каждого элемента существует обратный ему элемент $(-\omega) + \omega = \phi$;
- умножение ассоциативно $c'(c''\omega) = (c'c'')\omega$;
- умножение на единицу оставляет элемент без изменения $1\omega = \omega$;
- сложение и умножение дистрибутивны $(c' + c'')\omega = c'\omega + c''\omega,\ c(\omega' + \omega'') = c\omega' + c\omega''$;

Однако не все эти требования выполняются для произвольного неограниченно выпуклого метрического пространства

Не гарантирована ассоциативность сложения.

Требования, предъявляемые к линейным операциям

- сложение коммутативно $\omega' + \omega'' = \omega'' + \omega'$

  и ассоциативно $\boxed{(\omega' + \omega'') + \omega''' = \omega' + (\omega'' + \omega''')}$;
- существует нулевой элемент $\omega + \phi = \omega,\ c\phi = \phi$;
- для каждого элемента существует обратный ему элемент $(-\omega) + \omega = \phi$;
- умножение ассоциативно $c'(c''\omega) = (c'c'')\omega$;
- умножение на единицу оставляет элемент без изменения $1\omega = \omega$;
- сложение и умножение дистрибутивны $(c' + c'')\omega = c'\omega + c''\omega,\ c(\omega' + \omega'') = c\omega' + c\omega''$;

Однако не все эти требования выполняются для произвольного неограниченно выпуклого метрического пространства

Не гарантирована ассоциативность сложения.

Требования, предъявляемые к линейным операциям

- сложение коммутативно $\omega' + \omega'' = \omega'' + \omega'$
  и ассоциативно $\boxed{(\omega' + \omega'') + \omega''' = \omega' + (\omega'' + \omega''')}$;
- существует нулевой элемент $\omega + \phi = \omega,\ c\phi = \phi$;
- для каждого элемента существует обратный ему элемент $(-\omega) + \omega = \phi$;
- умножение ассоциативно $c'(c''\omega) = (c'c'')\omega$;
- умножение на единицу оставляет элемент без изменения $1\omega = \omega$;
- сложение и умножение дистрибутивны $(c' + c'')\omega = c'\omega + c''\omega,\ c(\omega' + \omega'') = c\omega' + c\omega''$;

Однако не все эти требования выполняются для произвольного неограниченно выпуклого метрического пространства

Не гарантирована ассоциативность сложения.

Необходимое условие: Ординарность метрического пространства, т.е. единственность соосного элемента $x = \mathrm{Coax}\left(<\omega', \omega''>; c\right)$.

Требования, предъявляемые к линейным операциям

- сложение коммутативно $\omega' + \omega'' = \omega'' + \omega'$
  и ассоциативно $\boxed{(\omega' + \omega'') + \omega''' = \omega' + (\omega'' + \omega''')}$;
- существует нулевой элемент $\omega + \phi = \omega,\ c\phi = \phi$;
- для каждого элемента существует обратный ему элемент $(-\omega) + \omega = \phi$;
- умножение ассоциативно $c'(c''\omega) = (c'c'')\omega$;
- умножение на единицу оставляет элемент без изменения $1\omega = \omega$;
- сложение и умножение дистрибутивны $(c' + c'')\omega = c'\omega + c''\omega,\ c(\omega' + \omega'') = c\omega' + c\omega''$;

Однако не все эти требования выполняются для произвольного неограниченно выпуклого метрического пространства

Не гарантирована ассоциативность сложения.

Необходимое условие: Ординарность метрического пространства, т.е. единственность соосного элемента $x = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >;\ c\right)$.

Доказанное достаточное условие базируется на понятии евклидовой метрики.

Евклидовы метрики

Множество объектов реального мира Ω с метрикой $\rho(\omega',\omega'')$.

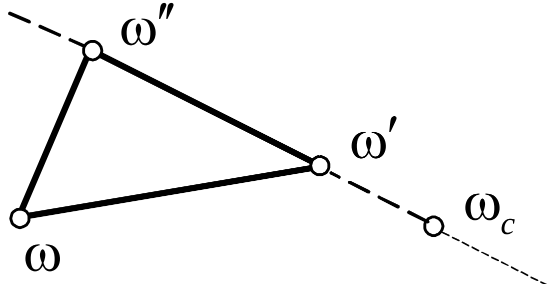
Метрика $\rho(\omega',\omega'')$ на Ω называется евклидовой, если для любого конечного подмножества элементов $\{\omega_j,\ j=1,...,m\}$ матрица $\left[-\rho^2(\omega_j,\omega_l),\ j,l=1,...,m\right]$ условно неотрицательно определена.

Квадратичная форма, образуемая этой матрицей в $\mathbb{R}^m$, неотрицательна на гиперплоскости с нулевой суммой аргументов $\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)a_j a_l \geq 0$, если $\sum_{j=1}^{N} a_j = 0$

Теорема 1. Евклидова метрика ординарна – для каждой пары $<\omega',\omega''>\in\Omega\times\Omega$ и коэффициента $c\in\mathbb{R}$ существует не более одного элемента $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(<\omega',\omega''>;\ c\right)\in\Omega$.

Теорема 2. В метрическом пространстве с евклидовой метрикой для всякого элемента $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(<\omega',\omega''>;\ c\right)$ определены значения расстояний до всех элементов $\omega\in\Omega$:

$$\rho^2(\omega,\omega_c) = c^2\rho^2(\omega,\omega') + (1-c)^2\rho^2(\omega,\omega'') - c(1-c)\rho^2(\omega',\omega'')$$



Евклидовы метрики

Множество объектов реального мира Ω с метрикой $\rho(\omega', \omega'')$.

Метрика $\rho(\omega', \omega'')$ на Ω называется евклидовой, если для любого конечного подмножества элементов $\{\omega_j,\ j = 1, \ldots, m\}$ матрица $\left[-\rho^2(\omega_j, \omega_l),\ j, l = 1, \ldots, m\right]$ условно неотрицательно определена.

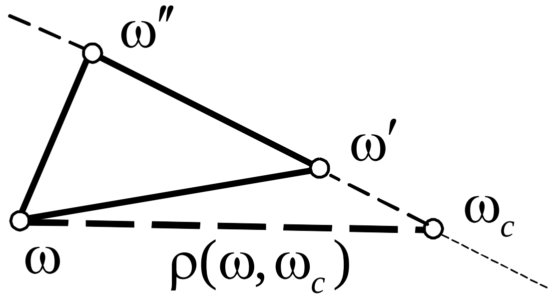
Квадратичная форма, образуемая этой матрицей в $\mathbb{R}^m$, неотрицательна на гиперплоскости с нулевой суммой аргументов

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

Теорема 1. Евклидова метрика ординарна – для каждой пары $< \omega', \omega'' > \in \Omega \times \Omega$ и коэффициента $c \in \mathbb{R}$ существует не более одного элемента $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >; c\right) \in \Omega$.

Теорема 2. В метрическом пространстве с евклидовой метрикой для всякого элемента $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >; c\right)$ определены значения расстояний до всех элементов $\omega \in \Omega$:

$$\rho^2(\omega, \omega_c) = c^2\rho^2(\omega, \omega') + (1-c)^2\rho^2(\omega, \omega'') - c(1-c)\rho^2(\omega', \omega'')$$



Евклидовы метрики

Множество объектов реального мира Ω с метрикой $\rho(\omega', \omega'')$.

Метрика $\rho(\omega', \omega'')$ на Ω называется евклидовой, если для любого конечного подмножества элементов $\{\omega_j,\ j = 1, \ldots, m\}$ матрица $\left[-\rho^2(\omega_j, \omega_l),\ j, l = 1, \ldots, m\right]$ условно неотрицательно определена.

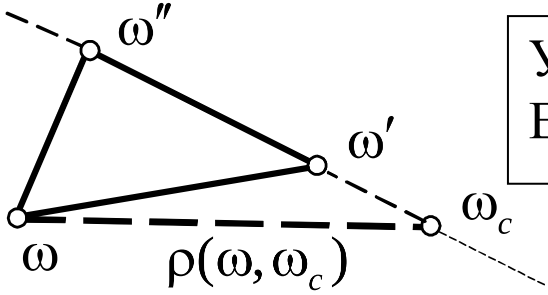
Квадратичная форма, образуемая этой матрицей в $\mathbb{R}^m$, неотрицательна на гиперплоскости с нулевой суммой аргументов

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

Теорема 1. Евклидова метрика ординарна – для каждой пары $<\omega', \omega''> \in \Omega \times \Omega$ и коэффициента $c \in \mathbb{R}$ существует не более одного элемента $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(<\omega', \omega''>; c\right) \in \Omega$.

Теорема 2. В метрическом пространстве с евклидовой метрикой для всякого элемента $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(<\omega', \omega''>; c\right)$ определены значения расстояний до всех элементов $\omega \in \Omega$:

$$\rho^2(\omega, \omega_c) = c^2\rho^2(\omega, \omega') + (1-c)^2\rho^2(\omega, \omega'') - c(1-c)\rho^2(\omega', \omega'')$$



Условность этого утверждения:
Если $\omega_c \in \Omega$ существует!

Пополнение метрического пространства с евклидовой метрикой

Множество объектов реального мира Ω с евклидовой метрикой $\rho(\omega', \omega'')$.

Если для какой-либо пары $< \omega', \omega'' > \Omega$ и какого-либо коэффициента $c \in \mathbb{R}$ в множестве Ω не существует соосного элемента $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >; c\right)$, то расширим это множество, добавив в него такой элемент $\tilde{\Omega} = \Omega \bigcup \{\omega_c\}$.

Так же поступим со всеми парами $< \omega', \omega'' > \Omega$, всеми числами $c \in \mathbb{R}$, и со всеми парами, образуемыми полученными соосными элементами.

Результат: Гипотетическое метрическое пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$, неограниченное и выпуклое, содержащее исходное множество объектов реального мира.

Неограниченное выпуклое метрическое пространство с евклидовой метрикой будем называть евклидовым метрическим пространством.

Множество всех элементов, соосных паре элементов $< \omega', \omega'' > \in \tilde{\Omega} \times \tilde{\Omega}$, $\omega' \neq \omega''$, будем называть осью в $\tilde{\Omega}$, определяемой этой парой:

$$\tilde{\Omega}_2(\omega', \omega'') = \left\{ \omega_c = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >; c\right), c \in \mathbb{R} \right\}$$

Евклидово метрическое пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ вместе с любой парой его элементов $< \omega', \omega'' > \in \tilde{\Omega} \times \tilde{\Omega}$ содержит также и всю определяемую ими ось.

Пополнение метрического пространства с евклидовой метрикой

Множество объектов реального мира Ω с евклидовой метрикой $\rho(\omega', \omega'')$.

Если для какой-либо пары $< \omega', \omega'' > \Omega$ и какого-либо коэффициента $c \in \mathbb{R}$ в множестве Ω не существует соосного элемента $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >; c\right)$, то расширим это множество, добавив в него такой элемент $\tilde{\Omega} = \Omega \bigcup \{\omega_c\}$.

Так же поступим со всеми парами $< \omega', \omega'' > \Omega$, всеми числами $c \in \mathbb{R}$, и со всеми парами, образуемыми полученными соосными элементами.

Результат: Гипотетическое метрическое пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$, неограниченное и выпуклое, содержащее исходное множество объектов реального мира.

Неограниченное выпуклое метрическое пространство с евклидовой метрикой будем называть евклидовым метрическим пространством.

Множество всех элементов, соосных паре элементов $< \omega', \omega'' > \in \tilde{\Omega} \times \tilde{\Omega}$, $\omega' \neq \omega''$, будем называть осью в $\tilde{\Omega}$, определяемой этой парой:

$$\tilde{\Omega}_2(\omega', \omega'') = \left\{\omega_c = \mathrm{Coax}\left(< \omega', \omega'' >; c\right), c \in \mathbb{R}\right\}$$

Евклидово метрическое пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ вместе с любой парой его элементов $< \omega', \omega'' > \in \tilde{\Omega} \times \tilde{\Omega}$ содержит также и всю определяемую ими ось.

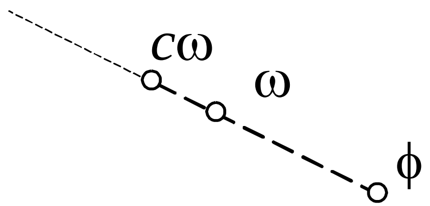
Минимальное евклидово метрическое пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$, содержащее данное метрическое пространство Ω, будем называть его неограниченным выпуклым замыканием.

Линейные операции в евклидовом метрическом пространстве

Произвольный выбор центра метрического пространства $\phi \in \tilde{\Omega}$.

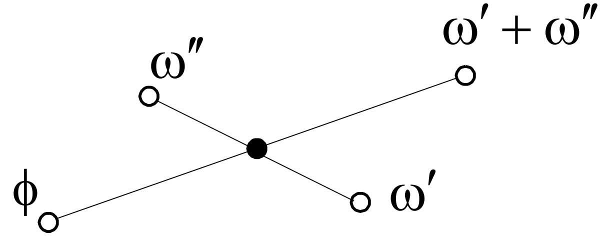
Умножение элемента $\omega \in \tilde{\Omega}$ на коэффициент

$$c\omega = \mathrm{Coax}\left(<\phi, \omega>; c\right)$$



Сложение элементов $\omega', \omega'' \in \tilde{\Omega}$

$$\omega' + \omega'' = 2\mathrm{Coax}(<\omega', \omega''>; 1/2)$$



Скалярное произведение двух элементов (потенциальная функция, кернел)

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

- Сложение коммутативно $\omega' + \omega'' = \omega'' + \omega'$
  и ассоциативно $(\omega' + \omega'') + \omega''' = \omega' + (\omega'' + \omega''')$;
- существует нулевой элемент $\omega + \phi = \omega$, $c\phi = \phi$;
- для каждого элемента существует обратный ему элемент $(-\omega) + \omega = \phi$;
- умножение ассоциативно $c'(c''\omega) = (c'c'')\omega$;
- умножение на единицу оставляет элемент без изменения $1\omega = \omega$;
- сложение и умножение дистрибутивны $(c' + c'')\omega = c'\omega + c''\omega$, $c(\omega' + \omega'') = c\omega' + c\omega''$;
- скалярное произведение линейно, $K_\phi(c'\omega' + c''\omega'', \omega''') = c'K_\phi(\omega', \omega''') + c''K_\phi(\omega'', \omega''')$;
- $K_\phi(\omega, \omega) \geq 0$, причем $K_\phi(\omega, \omega) = 0$ тогда и только тогда, когда $\omega = \phi$;
- $\rho(\omega', \omega'') = \Big[\underbrace{K_\phi(\omega', \omega') + K_\phi(\omega'', \omega'') - 2K_\phi(\omega', \omega'')}_{\geq 0}\Big]^{1/2}$.

Потенциальная функция (кернел) на множестве объектов, определяемая евклидовой метрикой

Множество объектов реального мира $\omega \in \Omega$

$\Downarrow$

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

условно положительно определенные матрицы $\left[-\rho^2(\omega_j, \omega_l),\ j, l = 1, ..., m\right]$

$\Downarrow$

пополнение метрического пространства Ω всеми соосными элементами $\tilde{\Omega} \supseteq \Omega$ и продолжение евклидовой метрики

$\Downarrow$

выбор центра $\phi \in \tilde{\Omega}$

$\Downarrow$

линейные операции в $\tilde{\Omega}$ с нулевым элементом $\phi \in \tilde{\Omega}$ и скалярным произведением

$K_\phi(\omega', \omega'')$: положительно определенные матрицы $\left[K_\phi(\omega_j, \omega_l),\ j, l = 1, ..., m\right]$

$\Downarrow$

преобразование кернела при изменении центра $\tilde{\phi} \in \tilde{\Omega}$

$$K_{\tilde{\phi}}(\omega', \omega'') = K_\phi(\omega', \omega'') - K_\phi(\omega', \tilde{\phi}) - K_\phi(\omega'', \tilde{\phi}) + K_\phi(\tilde{\phi}, \tilde{\phi})$$

Евклидова метрика в Ω порождает класс линейных пространств $\tilde{\Omega} \supseteq \Omega$ с разными нулевыми элементами, разными линейными операциями, разными скалярными произведениями, но с одной и той же евклидовой метрикой $\rho(\omega', \omega'')$.

Евклидова метрика на множестве объектов, определяемая потенциальной функцией (кернелом)

Множество объектов реального мира $\omega \in \Omega$

$\Downarrow$

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

положительно определенные матрицы $\left[K(\omega_j, \omega_l),\ j, l = 1, ..., m \right]$

$\Downarrow$

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

$\Downarrow$

пополнение метрического пространства Ω всеми соосными элементами $\tilde{\Omega} \supseteq \Omega$
и продолжение евклидовой метрики

$\Downarrow$

центр автоматически определен как $\phi \in \tilde{\Omega}$: $K(\phi, \phi) = 0$

$\Downarrow$

линейные операции в $\tilde{\Omega}$ с нулевым элементом $\phi \in \tilde{\Omega}$ и скалярным произведением $K(\omega', \omega'')$

$\Downarrow$

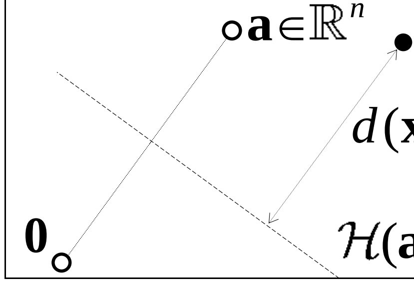
преобразование кернела при изменении центра $\tilde{\phi} \in \tilde{\Omega}$

$$K_{\tilde{\phi}}(\omega', \omega'') = K(\omega', \omega'') - K(\omega', \tilde{\phi}) - K(\omega'', \tilde{\phi}) + K(\tilde{\phi}, \tilde{\phi})$$

Класс эквивалентных кернелов в Ω порождает класс линейных пространств $\tilde{\Omega} \supseteq \Omega$ с разными нулевыми элементами, разными линейными операциями, разными скалярными произведениями, но с одной и той же евклидовой метрикой $\rho(\omega', \omega'')$.

Линейный принцип восстановления зависимостей на основе потенциальной функции (Kernel-based Dependence Estimation)

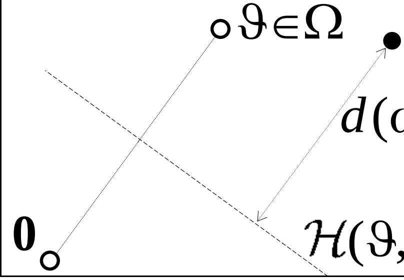
Объекты $\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n$ Линейный принцип в $\mathbb{R}^n$:



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

$$\mathcal{H}(\mathbf{a},b)=\{\mathbf{x}': d(\mathbf{x}'\,|\,\mathbf{a},b)=0\}$$

Объекты $\omega\in\Omega$. Линейный принцип в $\tilde{\Omega}\supset\Omega$:



$$d(\omega\,|\,\vartheta,b)=\frac{K(\vartheta,\omega)+b}{\big(K(\vartheta,\vartheta)\big)^{1/2}}$$

$$\mathcal{H}(\vartheta,b)=\{\omega': d(\omega'\,|\,\vartheta,b)=0\}$$

Распознавание объектов двух классов, метод опорных векторов

Критерий обучения в $\mathbb{R}^n$:

$$\begin{cases}\boxed{\mathbf{a}^T\mathbf{a}}+C\sum_{j=1}^N\delta_j\to\min(\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n, b\in\mathbb{R}, \delta_1,\dots,\delta_N\in\mathbb{R}),\\ y_j(\boxed{\mathbf{a}^T\mathbf{x}_j}+b)\ge 1-\delta_j,\ \delta_j\ge 0,\ j=1,\dots,N.\end{cases}$$

Двойственная задача:

$$\begin{cases}\sum_{j=1}^N\lambda_j-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^N\sum_{l=1}^N y_j y_l\boxed{\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}_l}\lambda_j\lambda_l\to\max,\\ \sum_{j=1}^N y_j\lambda_j=0,\ \ 0\le\lambda_j\le C/2,\ \ j=1,\dots,N.\end{cases}$$

Правило классификации нового объекта:

$$d(\mathbf{x})\propto\sum_{j:\lambda_j>0}y_j\lambda_j\boxed{\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}}+b=\sum_{j:\lambda_j>0}c_j\boxed{\mathbf{x}_j^T\mathbf{x}}+b\gtrless 0$$

Критерий обучения в $\tilde{\Omega}$:

$$\begin{cases}\boxed{K(\vartheta,\vartheta)}+C\sum_{j=1}^N\delta_j\to\min(\vartheta\in\tilde{\Omega}, b\in\mathbb{R}, \delta_1,\dots,\delta_N\in\mathbb{R}),\\ y_j(\boxed{K(\vartheta,\omega_j)}+b)\ge 1-\delta_j,\ \delta_j\ge 0,\ j=1,\dots,N.\end{cases}$$

Двойственная задача:

$$\begin{cases}\sum_{j=1}^N\lambda_j-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^N\sum_{l=1}^N y_j y_l\boxed{K(\omega_j,\omega_k)}\lambda_j\lambda_l\to\max,\\ \sum_{j=1}^N y_j\lambda_j=0,\ \ 0\le\lambda_j\le C/2,\ \ j=1,\dots,N.\end{cases}$$

Правило классификации нового объекта:

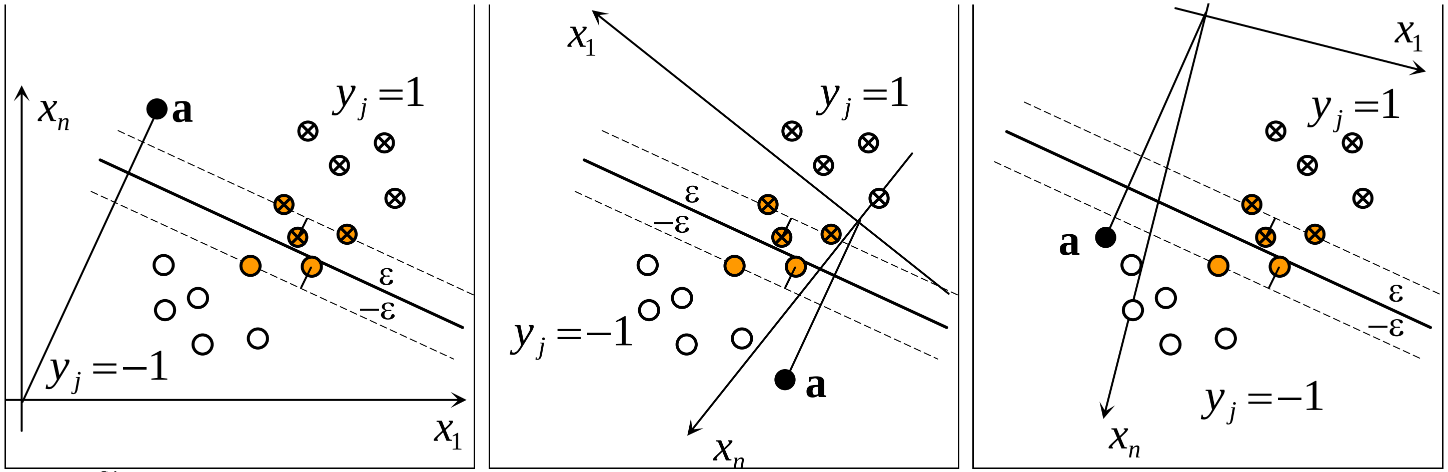
$$d(\omega)\propto\sum_{j:\lambda_j>0}y_j\lambda_j\boxed{K(\omega_j,\omega)}+b=\sum_{j:\lambda_j>0}c_j\boxed{K(\omega_j,\omega)}+b\gtrless 0$$

Напомним: Существует континуум линейных пространств и кернелов, выражающих одну и ту же евклидову метрику, различающихся лишь выбором нулевого элемента.

Правило классификации нового объекта, полученное по обучающей совокупности, определяется только взаимными евклидовыми расстояниями между объектами обучающей совокупности $\{\rho(\omega_j, \omega_l),\ y(\omega_j),\quad j,l = 1,\dots,N\}$

В частности, в $\mathbb{R}^n$:

$\rho(\omega_j, \omega_l) = \| \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l \|$



В линейном пространстве $\tilde{\Omega}$, определяемом кернелом:

$$\rho(\omega_j, \omega_l) = \left[K_\phi(\omega_j, \omega_j) + K_\phi(\omega_l, \omega_l) - 2K_\phi(\omega_j, \omega_l) \right]^{1/2}$$

Правило классификации нового объекта:

$$d(\mathbf{x}) \propto \sum_{j:\ \text{опорные объекты}} c_j \mathbf{x}_j^T \mathbf{x} + b \gtrless 0 \qquad d(\omega) \propto \sum_{j:\ \text{опорные объекты}} c_j K(\omega_j, \omega) + b \gtrless 0$$

При переносе нуля линейного пространства коэффициенты c_j, определяющие расстояние объекта от метрической гиперплоскости, будут изменяться, но состав множества опорных объектов и само значение расстояния остается неизменным.

Как обойтись без выбора нулевого элемента при погружении множества объектов с евклидовой метрикой в линейное пространство?

Как обеспечить возможность интерполяции непосредственно между элементами евклидова метрического пространства при выборе метрической гиперплоскости?

Аффинные операции в евклидовом метрическом пространстве

Пусть Ω – множество объектов реального мира с евклидовой метрикой $\rho(\omega', \omega'')$:
$\sum_{j=1}^{m}\sum_{l=1}^{m}\left(-\rho^2(\omega_j, \omega_l)\right)a_j a_l \geq 0$, если $\sum_{j=1}^{m} a_j = 0$.
Пусть $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ – евклидово метрическое пространство, являющееся его неограниченным выпуклым замыканием.

Напомним, что евклидово метрическое пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ вместе с любой парой его элементов $<\omega', \omega''> \in \tilde{\Omega} \times \tilde{\Omega}$ содержит также и всю определяемую ими ось $\tilde{\Omega}_2(\omega', \omega'') = \left\{\omega_c = \mathrm{Coax}\left(<\omega', \omega''>; c\right), c \in \mathbb{R}\right\} \subset \tilde{\Omega}$.

Обобщим понятие соосности на произвольную конечную неупорядоченную совокупность элементов евклидова метрического пространства $\left\{\omega_1, ..., \omega_m\right\} \subset \tilde{\Omega}$.

Пусть $\mathbf{c} = (c_1 \cdots c_m)^T \in \mathbb{R}^m$ – числовой вектор, такой что условию $\sum_{j=1}^{m} c_j = 1$, т.е. $\mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1$.

Рассмотрим семейство функций $f(\omega \mid \omega_1, ..., \omega_m; c_1, ..., c_m) = \sum_{j=1}^{m} c_j \rho^2(\omega_j, \omega)$, $\tilde{\Omega} \underset{c_1, ..., c_m}{\overset{\omega_1, ..., \omega_m}{\rightarrow}} \mathbb{R}$.

Теорема. В евклидовом метрическом пространстве существует единственный элемент $\omega_{\mathbf{c}} = \underset{\omega \in \tilde{\Omega}}{\arg\min} \sum_{j=1}^{m} c_j \rho^2(\omega_j, \omega)$.

Определение. Элемент $\omega_{\mathbf{c}} \in \tilde{\Omega}$ называется аффинной комбинацией элементов $\left\{\omega_1, ..., \omega_m\right\} \subset \tilde{\Omega}$ с коэффициентами $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1$, и обозначается $\omega_{\mathbf{c}} = \mathrm{A}_{j=1}^{m} c_j \omega_j$.

Аффинные операции в евклидовом метрическом пространстве

Пусть $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ – евклидово метрическое пространство, являющееся неограниченным выпуклым замыканием множества объектов реального мира Ω.

Напомним, что евклидово метрическое пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ вместе с любой парой его элементов $<\omega', \omega''> \in \tilde{\Omega} \times \tilde{\Omega}$ содержит также и всю определяемую ими ось $\tilde{\Omega}_2(\omega', \omega'') = \left\{ \omega_c = \mathrm{Coax}\left(<\omega', \omega''>; c \right), c \in \mathbb{R} \right\} \subset \tilde{\Omega}$.

Обобщим понятие соосности на произвольную конечную неупорядоченную совокупность элементов евклидова метрического пространства $\left\{ \omega_1, ..., \omega_m \right\} \subset \tilde{\Omega}$.

Пусть $\mathbf{c} = (c_1 \cdots c_m)^T \in \mathbb{R}^m$ – числовой вектор, такой что условию $\sum_{j=1}^{m} c_j = 1$, т.е. $\mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1$.

Рассмотрим семейство функций $f(\omega \,|\, \omega_1, ..., \omega_m; c_1, ..., c_m) = \sum_{j=1}^{m} c_j \rho^2(\omega_j, \omega)$, $\tilde{\Omega} \underset{c_1, ..., c_m}{\overset{\omega_1, ..., \omega_m}{\longrightarrow}} \mathbb{R}$.

Теорема. В евклидовом метрическом пространстве существует единственный элемент $\omega_{\mathbf{c}} = \arg\min\limits_{\omega \in \tilde{\Omega}} \sum_{j=1}^{m} c_j \rho^2(\omega_j, \omega)$.

Определение. Элемент $\omega_{\mathbf{c}} \in \tilde{\Omega}$ называется аффинной комбинацией элементов $\left\{ \omega_1, ..., \omega_m \right\} \subset \tilde{\Omega}$ с коэффициентами $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1$, и обозначается $\omega_{\mathbf{c}} = \mathrm{A}_{j=1}^{m} c_j \omega_j$.

В частности, соосный элемент $\omega_c = \mathrm{Coax}\left(<\omega', \omega''>; c \right)$ является аффинной комбинацией двух элементов ω_1 и ω_2 с коэффициентами $c_1 = c$ и $c_2 = 1 - c$.

Аффинные операции в евклидовом метрическом пространстве

Пусть $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ – евклидово метрическое пространство, являющееся неограниченным выпуклым замыканием множества объектов реального мира Ω.

Напомним, что евклидово метрическое пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ вместе с любой парой его элементов $<\omega', \omega''> \in \tilde{\Omega} \times \tilde{\Omega}$ содержит также и всю определяемую ими ось $\tilde{\Omega}_2(\omega', \omega'') = \left\{\omega_c = \mathrm{Coax}\left(<\omega', \omega''>; c\right), c \in \mathbb{R}\right\} \subset \tilde{\Omega}$.

Обобщим понятие соосности на произвольную конечную неупорядоченную совокупность элементов евклидова метрического пространства $\left\{\omega_1, ..., \omega_m\right\} \subset \tilde{\Omega}$.

Пусть $\mathbf{c} = (c_1 \cdots c_m)^T \in \mathbb{R}^m$ – числовой вектор, такой что условию $\sum_{j=1}^m c_j = 1$, т.е. $\mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1$.

Рассмотрим семейство функций $f(\omega \,|\, \omega_1, ..., \omega_m; c_1, ..., c_m) = \sum_{j=1}^m c_j \rho^2(\omega_j, \omega)$, $\tilde{\Omega} \overset{\omega_1, ..., \omega_m}{\underset{c_1, ..., c_m}{\to}} \mathbb{R}$.

Теорема. В евклидовом метрическом пространстве существует единственный элемент $\omega_{\mathbf{c}} = \arg\min\limits_{\omega \in \tilde{\Omega}} \sum_{j=1}^m c_j \rho^2(\omega_j, \omega)$.

Определение. Элемент $\omega_{\mathbf{c}} \in \tilde{\Omega}$ называется аффинной комбинацией элементов $\left\{\omega_1, ..., \omega_m\right\} \subset \tilde{\Omega}$ с коэффициентами $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1$, и обозначается $\omega_{\mathbf{c}} = \mathrm{A}_{j=1}^m c_j \omega_j$.

Теорема. Евклидово расстояние между произвольным элементом $\omega \in \tilde{\Omega}$ и заданной аффинной комбинацией $\omega_{\mathbf{c}} = \mathrm{A}_{j=1}^m c_j \omega_j$, $\left\{\omega_1, ..., \omega_m\right\} \subset \tilde{\Omega}$, $\mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1$, определяется выражением

$$\rho^2(\omega_{\mathbf{c}}, \omega) = \sum_{j=1}^m c_j \rho^2(\omega_j, \omega) - (1/2) \sum_{j=1}^m \sum_{l=1}^m c_j c_l \rho^2(\omega_j, \omega_l)$$

Евклидово аффинное пространство

Аффинная комбинация конечной совокупности элементов евклидова метрического пространства $\{\omega_1,...,\omega_m\}\subset\tilde{\Omega}$ с коэффициентами $\mathbf{c}=(c_1\cdots c_m)^T\in\mathbb{R}^m$, $\sum_{j=1}^m c_j=1$:

$$\omega_{\mathbf{c}}=\mathrm{A}_{j=1}^m c_j\omega_j=\arg\min_{\omega\in\tilde{\Omega}}\sum_{j=1}^m c_j\rho^2(\omega_j,\omega)\in\tilde{\Omega}.$$

Евклидово расстояние между произвольным элементом $\omega\in\tilde{\Omega}$ и заданной аффинной комбинацией $\omega_{\mathbf{c}}=\mathrm{A}_{j=1}^m c_j\omega_j$ определяется выражением

$$\rho^2(\omega_{\mathbf{c}},\omega)=\sum_{j=1}^m c_j\rho^2(\omega_j,\omega)-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^m\sum_{l=1}^m c_jc_l\rho^2(\omega_j,\omega_l)$$

Наличие операции аффинной комбинации любого конечного числа элементов позволяет называть евклидово метрическое пространство $\tilde{\Omega}$ евклидовым аффинным пространством. От евклидова линейного пространства его отличает только отсутствие нулевого элемента. Если дополнительно назначить любой элемент в качестве нулевого $\phi\in\tilde{\Omega}$, то евклидова метрика $\rho(\omega',\omega'')$ порождает в $\tilde{\Omega}$, во-первых, линейные операции сложения двух элементов и умножения элемента на действительный коэффициент, и, во-вторых, скалярное произведение (кернел): $K_\phi(\omega',\omega'')=(1/2)\left[\rho^2(\omega',\phi)+\rho^2(\omega'',\phi)-\rho^2(\omega',\omega'')\right]$.

Евклидова метрика $\rho(\omega',\omega'')$ порождает континуум разных линейных пространств и кернелов, но все они определяют одну и ту же исходную метрику

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

Диполь и аффинная гиперплоскость в евклидовом метрическом (аффинном) пространство

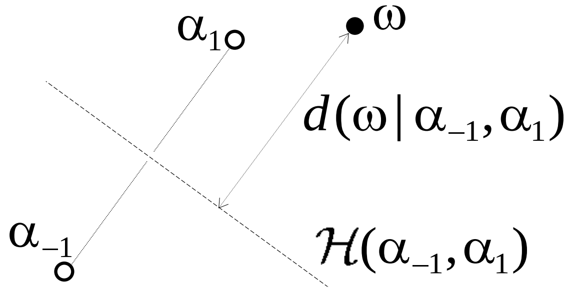
Евклидово метрическое (аффинное) пространство $\tilde{\Omega} \supset \Omega$ с метрикой $\rho(\omega', \omega'')$.

Диполь $< \alpha_{-1}, \alpha_1 > \in \tilde{\Omega} \times \tilde{\Omega}$, $\quad \alpha_{-1}, \alpha_1 \in \tilde{\Omega}$ – узлы диполя.

$\tilde{\Omega}(\alpha_{-1}, \alpha_1) = \left\{ \vartheta \in \tilde{\Omega} : \rho(\alpha_{-1}, \vartheta) = \rho(\alpha_1, \vartheta) \right\}$ – аффинная гиперплоскость.

$\omega \in \tilde{\Omega}$ – произвольный элемент евклидова метрического пространства,

$d(\omega \mid \alpha_{-1}, \alpha_1)$ – его расстояние до аффинной гиперплоскости с учетом знака.



Теорема.

$$d(\omega \mid \alpha_{-1}, \alpha_1) = \frac{\rho^2(\alpha_{-1}, \omega) - \rho^2(\alpha_1, \omega)}{2\rho^2(\alpha_{-1}, \alpha_1)} \rho(\alpha_{-1}, \alpha_1).$$

Задача обучения распознаванию объектов двух классов: Принцип максимизации зазора (аналог задачи SVM)

Обучающая совокупность: $\left\{ \rho(\omega_j, \omega_l),\ y(\omega_j) = \pm 1;\ \ j, l = 1, \ldots, N \right\}$

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\varepsilon^2} + C \sum_{j=1}^{N} \delta_j \to \min(\alpha_{-1}, \alpha_1 \in \tilde{\Omega}, \varepsilon, \delta_1, \ldots, \delta_N), \\ d(\omega \mid \alpha_{-1}, \alpha_1) \geq \varepsilon - \delta_j,\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, \ldots, N,\ \rho(\alpha_{-1}, \alpha_1) = 1. \end{cases}$$

Представление искомых узлов диполя:

$\alpha_{-1} = \mathrm{A}_{j=1}^{N} q_{-1,j} \omega_j, \qquad \alpha_1 = \mathrm{A}_{j=1}^{N} q_{1,j} \omega_j,$

$q_{-1,j} = g_j - (\tfrac{1}{2} - \boxed{c}) \boxed{a_j},\ q_{1,j} = g_j + (\tfrac{1}{2} + \boxed{c}) \boxed{a_j},$

$\sum_{j=1}^{N} g_j = 1$ – любые числа, $\sum_{j=1}^{N} \boxed{a_j} = 0.$

Задача обучения распознаванию объектов двух классов: Принцип максимизации зазора (аналог задачи SVM)

Обучающая совокупность: $\left\{\rho(\omega_j,\omega_l),\ y(\omega_j)=\pm 1;\ \ j,l=1,\ldots,N\right\}$

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\varepsilon^2}+C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \rightarrow \min(\alpha_{-1},\alpha_1\in\tilde{\Omega},\varepsilon,\delta_1,\ldots,\delta_N), \\ d(\omega\,|\,\alpha_{-1},\alpha_1)\geq\varepsilon-\delta_j,\ \delta_j\geq 0,\ j=1,\ldots,N,\ \rho(\alpha_{-1},\alpha_1)=1. \end{cases}$$

Представление искомых узлов диполя:

$$\alpha_{-1}=\mathrm{A}_{j=1}^{N}q_{-1,j}\omega_j,\qquad \alpha_1=\mathrm{A}_{j=1}^{N}q_{1,j}\omega_j,$$

$$q_{-1,j}=g_j-\left(\tfrac{1}{2}-\boxed{c}\right)\boxed{a_j},\ \ q_{1,j}=g_j+\left(\tfrac{1}{2}+\boxed{c}\right)\boxed{a_j},$$

$\sum_{j=1}^{N}g_j=1$ – любые числа, $\sum_{j=1}^{N}\boxed{a_j}=0$.

В условиях принятых предположений достаточно искать дискриминантную функцию в виде

$$d(\omega\,|\,a_1,\ldots,a_N,b)=\frac{1}{2}\left(\sum_{j=1}^{N}a_j\left(-\rho^2(\omega_j,\omega)\right)+b\right)$$

Эквивалентная формулировка задачи:

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

Задача обучения распознаванию объектов двух классов: Принцип максимизации зазора (аналог задачи SVM)

Обучающая совокупность: $\left\{\rho(\omega_j,\omega_l),\ y(\omega_j)=\pm 1;\ \ j,l=1,...,N\right\}$

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\varepsilon^2}+C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(\alpha_{-1},\alpha_1\in\tilde{\Omega},\varepsilon,\delta_1,...,\delta_N), \\ d(\omega\,|\,\alpha_{-1},\alpha_1)\geq\varepsilon-\delta_j,\ \delta_j\geq 0,\ j=1,...,N,\ \rho(\alpha_{-1},\alpha_1)=1. \end{cases}$$

Представление искомых узлов диполя:

$$\alpha_{-1}=\mathrm{A}_{j=1}^{N}q_{-1,j}\omega_j,\qquad \alpha_1=\mathrm{A}_{j=1}^{N}q_{1,j}\omega_j,$$

$$q_{-1,j}=g_j-(\tfrac{1}{2}-c)\boxed{a_j},\ q_{1,j}=g_j+(\tfrac{1}{2}+c)\boxed{a_j},$$

$\sum_{j=1}^{N}g_j=1$ – любые числа, $\sum_{j=1}^{N}\boxed{a_j}=0$.

В условиях принятых предположений достаточно искать дискриминантную функцию в виде

$$d(\omega\,|\,a_1,...,a_N,b)=\frac{1}{2}\left(\sum_{j=1}^{N}a_j\left(-\rho^2(\omega_j,\omega)\right)+b\right)$$

Эквивалентная формулировка задачи:

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

Задача обучения распознаванию объектов двух классов: Принцип максимизации зазора (аналог задачи SVM)

Обучающая совокупность: $\left\{\rho(\omega_j,\omega_l),\ y(\omega_j)=\pm 1;\ \ j,l=1,...,N\right\}$

Эквивалентная формулировка задачи:

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

Это задача квадратичного программирования

Двойственная задача:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \dfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}y_j y_l\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N}y_j\lambda_j = 0,\ 0\leq\lambda_j\leq C/2,\ j=1,...,N. \end{cases}$$

Для сравнения:
двойственная задача Kernel-based SVM

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \dfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}y_j y_l K(\omega_j,\omega_k)\,\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N}y_j\lambda_j = 0,\ 0\leq\lambda_j\leq C/2,\ j=1,...,N. \end{cases}$$

Задача обучения распознаванию объектов двух классов: Принцип максимизации зазора (аналог задачи SVM)

Обучающая совокупность: $\left\{\rho(\omega_j,\omega_l),\ y(\omega_j)=\pm 1;\ \ j,l=1,...,N\right\}$

Эквивалентная формулировка задачи:

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

Это задача квадратичного программирования

Двойственная задача:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \dfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}y_j y_l \boxed{\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)}\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N}y_j\lambda_j = 0,\ 0\leq\lambda_j\leq C/2,\ j=1,...,N. \end{cases}$$

Для сравнения:
двойственная задача Kernel-based SVM

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \dfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}y_j y_l \boxed{K(\omega_j,\omega_k)}\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N}y_j\lambda_j = 0,\ 0\leq\lambda_j\leq C/2,\ j=1,...,N. \end{cases}$$

Задача обучения распознаванию объектов двух классов: Принцип максимизации зазора (аналог задачи SVM)

Обучающая совокупность: $\left\{\rho(\omega_j,\omega_l),\ y(\omega_j)=\pm 1;\ \ j,l=1,\ldots,N\right\}$

Эквивалентная формулировка задачи:

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

Это задача квадратичного программирования

Двойственная задача:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \dfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}y_j y_l\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N}y_j\lambda_j = 0,\ 0\le\lambda_j\le C/2,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$$

Правило классификации нового объекта:

$$d(\omega)\propto\sum_{j:\lambda_j>0}y_j\lambda_j\left(-\rho^2(\omega_j,\omega)\right)+b \gtrless 0$$

Для сравнения:
двойственная задача Kernel-based SVM

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \dfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}y_j y_l K(\omega_j,\omega_k)\,\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N}y_j\lambda_j = 0,\ 0\le\lambda_j\le C/2,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$$

Правило классификации нового объекта:

$$d(\omega)\propto\sum_{j:\lambda_j>0}y_j\lambda_j K(\omega_j,\omega)+b \gtrless 0$$

Задача обучения распознаванию объектов двух классов: Принцип максимизации зазора (аналог задачи SVM)

Обучающая совокупность: $\left\{\rho(\omega_j,\omega_l),\ y(\omega_j)=\pm 1;\ \ j,l=1,\ldots,N\right\}$

Эквивалентная формулировка задачи:

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

Это задача квадратичного программирования

Двойственная задача:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \dfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}y_j y_l\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N}y_j\lambda_j = 0,\ 0\leq\lambda_j\leq C/2,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$$

Правило классификации нового объекта:

$$d(\omega)\propto\sum_{j:\lambda_j>0}y_j\lambda_j\left(-\rho^2(\omega_j,\omega)\right)+b\ = $$

$$=\sum_{j=1}^{N}c_j\rho^2(\omega_j,\omega)+b\gtrless 0$$

Для сравнения:
двойственная задача Kernel-based SVM

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \dfrac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}y_j y_l K(\omega_j,\omega_k)\,\lambda_j\lambda_l \to \max, \\ \sum_{j=1}^{N}y_j\lambda_j = 0,\ 0\leq\lambda_j\leq C/2,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$$

Правило классификации нового объекта:

$$d(\omega)\propto\sum_{j:\lambda_j>0}y_j\lambda_j K(\omega_j,\omega)+b\ =$$

$$=\sum_{j=1}^{N}c_j K(\omega_j,\omega)+b\gtrless 0$$

Задача обучения для произвольной функции попарного сравнения объектов: *Relational Dependence Estimation*

Доступна лишь функция попарного сравнения объектов $S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{S}\subseteq\mathbb{R}$

Обучающая совокупность: $\Omega^*=\{\omega_j,\ j=1,...,N\}$: $\{S(\omega_j,\omega_l),\ y_j=y(\omega_j),\ j,l=1,...,N\}$

Вектор вторичных признаков объекта $\omega\in\Omega$ относительно обучающей совокупности: $\mathbf{x}(\omega)=\big(x_k(\omega)=S(\omega_k,\omega),\ k=1,...,N\big)\in\mathbb{R}^N$.

Классический критерий обучения SVM:

$$\begin{cases}\sum_{k=1}^N a_k^2+C\sum_{j=1}^N\delta_j\to\min(a_1,...,a_{N^0},b,\delta_1,...,\delta_N),\\ y_j\left(\sum_{k=1}^N a_kS(\omega_k,\omega_j)+b\right)\geq 1-\delta_j,\ \delta_j\geq 0,\ j=1,...,N.\end{cases}$$

Обучение проводится по N объектам обучающей совокупности, представленным N вторичными признаками относительно обучающих (базисных) объектов.

$$d(\omega)=\sum_{k=1}^N\underbrace{\left(\sum_{j:\lambda_j>0}y_j\lambda_jS(\omega_k,\omega_j)\right)}_{a_k}S(\omega_k,\omega)+b=$$

$$=\sum_{k=1}^N a_kS(\omega_k,\omega)+b\gtrless 0$$

Результат обучения: Дискриминантная функция, применимая к произвольному объекту $\omega\in\Omega$

В дискриминантной функции участвуют все объекты обучающей совокупности
(R. Duin: Relational Discriminant Analysis)

Обучение для заданной функции попарного сравнения с отбором базисных объектов: *Relevance Object Machine*

Michael Tipping, Christopher Bishop: Оставить лишь наиболее информативные (релевантные) базисные объекты $a_k \neq 0$, игнорируя остальные $a_k = 0$.

Искомое решающее правило: $d(\omega) = \sum\limits_{k:\ \text{релевантные объекты}} a_k S(\omega_k, \omega) + b \gtrless 0$

Идея Tipping&Bishop:
Априорное вероятностное представление об искомом векторе коэффициентов $\mathbf{a}$

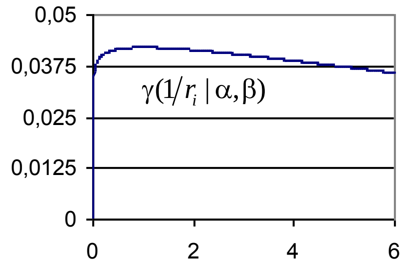
$\mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) = \prod_{k=1}^{N} \mathcal{N}(a_k \mid 0, 1/r_k)$

чем меньше r_k, тем ближе априори a_k к нулю

Дополнительное предположение Tipping&Bishop: Меры точности $1/r_k$ также априори независимы, случайны и распределены по гамма закону

$G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{N} \gamma(1/r_k \mid \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{N} \frac{\beta^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)} (1/r_k)^{\alpha-1} \exp\left(-\beta(1/r_k)\right)$

Если $\alpha, \beta \to \infty$ и $\alpha/\beta \to \infty$, то гамма-распределение $\gamma(1/r \mid \alpha, \beta) \to$ к равномерному на $(0, \infty)$



Полное априорное распределение вектора коэффициентов $\mathbf{a} = (a_1, ..., a_N)$:

$\Psi(\mathbf{a} \mid \alpha, \beta) = \int_{\mathbb{R}^N} \mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) d\mathbf{r}$

Обучение для заданной функции попарного сравнения с отбором базисных объектов: *Relevance Object Machine*

Michael Tipping, Christopher Bishop: Оставить лишь наиболее информативные (релевантные) базисные объекты $a_k \neq 0$, игнорируя остальные $a_k = 0$.

Искомое решающее правило: $d(\omega) = \sum\limits_{k:\ \text{релевантные объекты}} a_k S(\omega_k, \omega) + b \gtrless 0$

Идея Tipping&Bishop:
Априорное вероятностное представление об искомом векторе коэффициентов $\mathbf{a}$

$\mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) = \prod_{k=1}^{N} \mathcal{N}(a_k \mid 0, 1/r_k)$
чем меньше r_k, тем ближе априори a_k к нулю

Дополнительное предположение Tipping&Bishop: Меры точности $1/r_k$ также априори независимы, случайны и распределены по гамма закону

$G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{N} \gamma(1/r_k \mid \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{N} \frac{\beta^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)} (1/r_k)^{\alpha-1} \exp\big(-\beta(1/r_k)\big)$

Полное априорное распределение вектора коэффициентов $\mathbf{a} = (a_1, ..., a_N)$:

$\Psi(\mathbf{a} \mid \alpha, \beta) = \int_{\mathbb{R}^N} \mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) d\mathbf{r}$, $G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta)$ близко к равномерному распределению

Регуляризованный критерий обучения
$$\begin{cases} -\ln \int \mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) d\mathbf{r} + C \sum_{j=1}^{N} \delta_j \to \min(a_1, ..., a_{N^0}, b, \delta_1, ..., \delta_N), \\ y_j \left(\sum_{k=1}^{N} a_k S(\omega_k, \omega_j) + b \right) \geq 1 - \delta_j,\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, ..., N. \end{cases}$$

Далее Tipping&Bishop применяют EM-алгоритм. При этом приходится прибегать к эвристикам из-за наличия ограничений типа неравенств. Задача невыпукла.

Обучение для заданной функции попарного сравнения с отбором базисных объектов: *Relevance Object Machine*

Michael Tipping, Christopher Bishop: Оставить лишь наиболее информативные (релевантные) базисные объекты $a_k \neq 0$, игнорируя остальные $a_k = 0$.

Искомое решающее правило: $d(\omega) = \sum_{k:\ \text{релевантные объекты}} a_k S(\omega_k, \omega) + b \gtrless 0$

Идея Tipping&Bishop:
Априорное вероятностное представление об искомом векторе коэффициентов $\mathbf{a}$

$\mathcal{N}(\mathbf{a}\,|\,\mathbf{r}) = \prod_{k=1}^{N} \mathcal{N}(a_k\,|\,0, 1/r_k)$
чем меньше r_k, тем ближе априори a_k к нулю

Дополнительное предположение Tipping&Bishop: Меры точности $1/r_k$ также априори независимы, случайны и распределены по гамма закону

$G(\mathbf{r}\,|\,\alpha,\beta) = \prod_{k=1}^{N} \gamma(1/r_k\,|\,\alpha,\beta) = \prod_{k=1}^{N} \frac{\beta^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)} (1/r_k)^{\alpha-1} \exp\big(-\beta(1/r_k)\big)$

Полное априорное распределение вектора коэффициентов $\mathbf{a} = (a_1, ..., a_N)$:

$\Psi(\mathbf{a}\,|\,\alpha,\beta) = \int_{\mathbb{R}^N} \mathcal{N}(\mathbf{a}\,|\,\mathbf{r}) G(\mathbf{r}\,|\,\alpha,\beta) d\mathbf{r}$, $G(\mathbf{r}\,|\,\alpha,\beta)$ близко к равномерному распределению

Регуляризованный критерий обучения
$$\begin{cases} -\ln \int \mathcal{N}(\mathbf{a}\,|\,\mathbf{r}) G(\mathbf{r}\,|\,\alpha,\beta) d\mathbf{r} + C \sum_{j=1}^{N} \delta_j \to \min(a_1, ..., a_{N^0}, b, \delta_1, ..., \delta_N), \\ y_j \left(\sum_{k=1}^{N} a_k S(\omega_k, \omega_j) + b \right) \geq 1 - \delta_j,\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, ..., N. \end{cases}$$

Такой метод обучения крайне селективен по отношению к базисным объектам – в качестве релевантных остаются лишь очень малое число объектов.

Обучение для заданной функции попарного сравнения с отбором базисных объектов: *Relevance Object Machine*

Michael Tipping, Christopher Bishop: Оставить лишь наиболее информативные (релевантные) базисные объекты $a_k \neq 0$, игнорируя остальные $a_k = 0$.

Искомое решающее правило: $\boxed{d(\omega) = \sum_{k:\ \text{релевантные объекты}} a_k S(\omega_k, \omega) + b \gtrless 0}$

Идея Tipping&Bishop:
Априорное вероятностное представление об искомом векторе коэффициентов $\mathbf{a}$

$\mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) = \prod_{k=1}^{N} \mathcal{N}(a_k \mid 0, 1/r_k)$
чем меньше r_k, тем ближе априори a_k к нулю

Дополнительное предположение Tipping&Bishop: Меры точности $1/r_k$ также априори независимы, случайны и распределены по гамма закону

$$G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{N} \gamma(1/r_k \mid \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{N} \frac{\beta^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)} (1/r_k)^{\alpha-1} \exp\big(-\beta(1/r_k)\big)$$

Полное априорное распределение вектора коэффициентов $\mathbf{a} = (a_1, ..., a_N)$:

$\Psi(\mathbf{a} \mid \alpha, \beta) = \int_{\mathbb{R}^N} \mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) d\mathbf{r}$, $G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta)$ близко к равномерному распределению

Регуляризованный критерий обучения
$$\begin{cases} -\ln \int \mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) d\mathbf{r} + C \sum_{j=1}^{N} \delta_j \to \min(a_1, ..., a_{N^0}, b, \delta_1, ..., \delta_N), \\ y_j \left(\sum_{k=1}^{N} a_k S(\omega_k, \omega_j) + b \right) \geq 1 - \delta_j,\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, ..., N. \end{cases}$$

Такой метод обучения крайне селективен по отношению к базисным объектам – в качестве релевантных остаются лишь очень малое число объектов.

Обучение для заданной функции попарного сравнения с отбором базисных объектов: *Relevance Object Machine*

Michael Tipping, Christopher Bishop: Оставить лишь наиболее информативные (релевантные) базисные объекты $a_k \neq 0$, игнорируя остальные $a_k = 0$.

Искомое решающее правило: $\boxed{d(\omega) = \sum_{k:\ \textit{релевантные объекты}} a_k S(\omega_k, \omega) + b \gtrless 0}$

Идея Tipping&Bishop:
Априорное вероятностное представление об искомом векторе коэффициентов $\mathbf{a}$

$\mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) = \prod_{k=1}^{N} \mathcal{N}(a_k \mid 0, 1/r_k)$
чем меньше r_k, тем ближе априори a_k к нулю

Дополнительное предположение Tipping&Bishop: Меры точности $1/r_k$ также априори независимы, случайны и распределены по гамма закону

$G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{N} \gamma(1/r_k \mid \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{N} \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} (1/r_k)^{\alpha-1} \exp\left(-\beta(1/r_k)\right)$

Полное априорное распределение вектора коэффициентов $\mathbf{a} = (a_1, ..., a_N)$:

$\Psi(\mathbf{a} \mid \alpha, \beta) = \int_{\mathbb{R}^N} \mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) d\mathbf{r}$, $\quad G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta)$ близко к равномерному распределению

Регуляризованный критерий обучения
$$\begin{cases} -\ln \int \mathcal{N}(\mathbf{a} \mid \mathbf{r}) G(\mathbf{r} \mid \alpha, \beta) d\mathbf{r} + C \sum_{j=1}^{N} \delta_j \to \min(a_1, ..., a_{N^0}, b, \delta_1, ..., \delta_N), \\ y_j \left(\sum_{k=1}^{N} a_k S(\omega_k, \omega_j) + b \right) \geq 1 - \delta_j,\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, ..., N. \end{cases}$$

Relevance Vector Machine – RVM, поскольку в качестве функции парного сравнения объектов $S(\omega', \omega'')$ Tipping&Bishop использовали кернел, погружающий множество объектов в линейное пространство, где они рассматриваются как векторы.

Relevance Object Machine – выпуклый критерий обучения в линейном пространстве вторичных признаков

Wang, Zhu, Zou: Doubly Regularized SVM – применение идеи Elastic Net для регрессии (Zou, Hastie, позднее Tibshirani) к SVM

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{N}\left((1-\mu)a_k^2+\mu|a_k|\right)+C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(a_1,...,a_N,b,\delta_1,...,\delta_N), \\ y_j\left(\sum_{k=1}^{N}a_k S(\omega_k,\omega_j)+b\right)\geq 1-\delta_j,\ \delta_j\geq 0,\ j=1,...,N. \end{cases}$$

$0\leq\mu\leq 1$ – параметр селективности

Этот критерий является выпуклым в отличие от невыпуклого критерия Tipping&Bishop

Для его оптимизации в двойственной форме удобно использовать итерационный метод внутренней точки. Этот метод делает относительно мало итераций, каждая из которых легко распараллеливается (аспирант МФТИ Николай Разин).

Итоговое решающее правило:

$$d(\omega)=\sum_{\underbrace{\omega_k\in\hat{\Omega}^*\subset\Omega^*}_{\text{подмножество релевантных объектов}}}\hat{a}_k S(\omega_k,\omega)+\hat{b}\begin{cases}>0\\<0\end{cases}$$

$\Omega^*=\left\{\omega_j,\ j=1,...,N\right\}$ – вся обучающая совокупность

$$\left\{S(\omega_j,\omega_l),\ y_j=y(\omega_j),\ j,l=1,...,N\right\}$$

Более общая концепция: Несколько разных функций парного сравнения объектов

Несколько функций попарного сравнения объектов $S_i(\omega', \omega''): \Omega \times \Omega \to \mathbb{S} \subseteq \mathbb{R},\ i = 1, ..., n$ (модальности попарного представления объектов).

Обучающая совокупность: $\Omega^* = \{\omega_j,\ j = 1, ..., N\}$: $\{S_i(\omega_j, \omega_l),\ y_j = y(\omega_j),\ j, l = 1, ..., N;\ i = 1, ..., n\}$.

Каждый объект характеризуется n векторами вторичных признаков относительно обучающей (базисной) совокупности: $\mathbf{x}_i(\omega) = \big(x_{ik}(\omega) = S_i(\omega_k, \omega),\ k = 1, ..., N\big) \in \mathbb{R}^N,\ i = 1, ..., n$.

Теперь отбирать надо не только релевантные объекты в базисной совокупности, но и релевантные модальности.

<u>Принцип тот же:</u> Wang, Zhu, Zou: Doubly Regularized SVM – применение к SVM идеи Elastic Net для регрессии (Zou, Hastie, позднее Tibshirani)

Выпуклый критерий обучения в линейном пространстве вторичных признаков:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{N} \left[(1-\mu) a_{ik}^2 + \mu |a_{ik}| \right] + C \sum_{j=1}^{N} \delta_j \to \min\big((a_{i1}, ..., a_{iN}), i = 1, ..., n, b, \delta_1, ..., \delta_N \big), \\ y_j \left[\sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{N} a_{ik} S_i(\omega_k, \omega) + b \right] \geq 1 - \delta_j,\ \delta_j \geq 0,\ j = 1, ..., N. \end{cases}$$

В результате обучения часть коэффициентов обращается в строгие нули $a_{ik} = 0$.

Параметр селективности комбинирования $0 \leq \mu \leq 1$.

Этот критерий одновременно отбирает модальности – Modality-Selective SVM, – и релевантные объекты – Relevance Vector (Object) Machine, RVM, – поэтому мы называем его RVM с отбором модальностей.

Более общая концепция: Несколько разных функций парного сравнения объектов

Несколько функций попарного сравнения объектов $S_i(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{S}\subseteq\mathbb{R}$, $i=1,...,n$ (модальности попарного представления объектов).

Обучающая совокупность: $\Omega^*=\{\omega_j,\ j=1,...,N\}$: $\{S_i(\omega_j,\omega_l),\ y_j=y(\omega_j),\ j,l=1,...,N;\ i=1,...,n\}$.

Каждый объект характеризуется n векторами вторичных признаков относительно обучающей (базисной) совокупности: $\mathbf{x}_i(\omega)=\big(x_{ik}(\omega)=S_i(\omega_k,\omega),\ k=1,...,N\big)\in\mathbb{R}^N$, $i=1,...,n$.

Теперь отбирать надо не только релевантные объекты в базисной совокупности, но и релевантные модальности.

<u>Принцип тот же:</u> Wang, Zhu, Zou: Doubly Regularized SVM – применение к SVM идеи Elastic Net для регрессии (Zou, Hastie, позднее Tibshirani)

Выпуклый критерий обучения в линейном пространстве вторичных признаков:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{N}\Big[(1-\mu)a_{ik}^2+\mu|a_{ik}|\Big]+C\sum_{j=1}^{N}\delta_j\to\min\big((a_{i1},...,a_{iN}),i=1,...,n,b,\delta_1,...,\delta_N\big), \\ y_j\Big[\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{N}a_{ik}S_i(\omega_k,\omega)+b\Big]\ge 1-\delta_j,\ \delta_j\ge 0,\ j=1,...,N. \end{cases}$$

В результате обучения часть коэффициентов обращается в строгие нули $a_{ik}=0$.

Параметр селективности комбинирования $0\le\mu\le 1$.

Результат обучения – решающе правило, применимое к новым объектам:

$d(\omega)=\sum\sum_{i,k:\,a_{ik}\neq 0}a_{ik}S_i(\omega_k,\omega)+b\gtrless 0$ – релевантные базисные объекты и релевантные модальности.

Типичная зависимость ошибки на контроле и числа релевантных объектов от уровня селективности вторичных признаков

N. Razin, D. Sungurov, V. Mottl, I. Torshin, V. Sulimova, O. Seredin, D. Windridge. Application of the Multi-modal Relevance Vector Machine to the problem of protein secondary structure prediction. Proceedings of the 7th IAPR International Conference on Pattern Recognition in Bioinformatics. November 8-10, 2012, Tokyo, Japan.

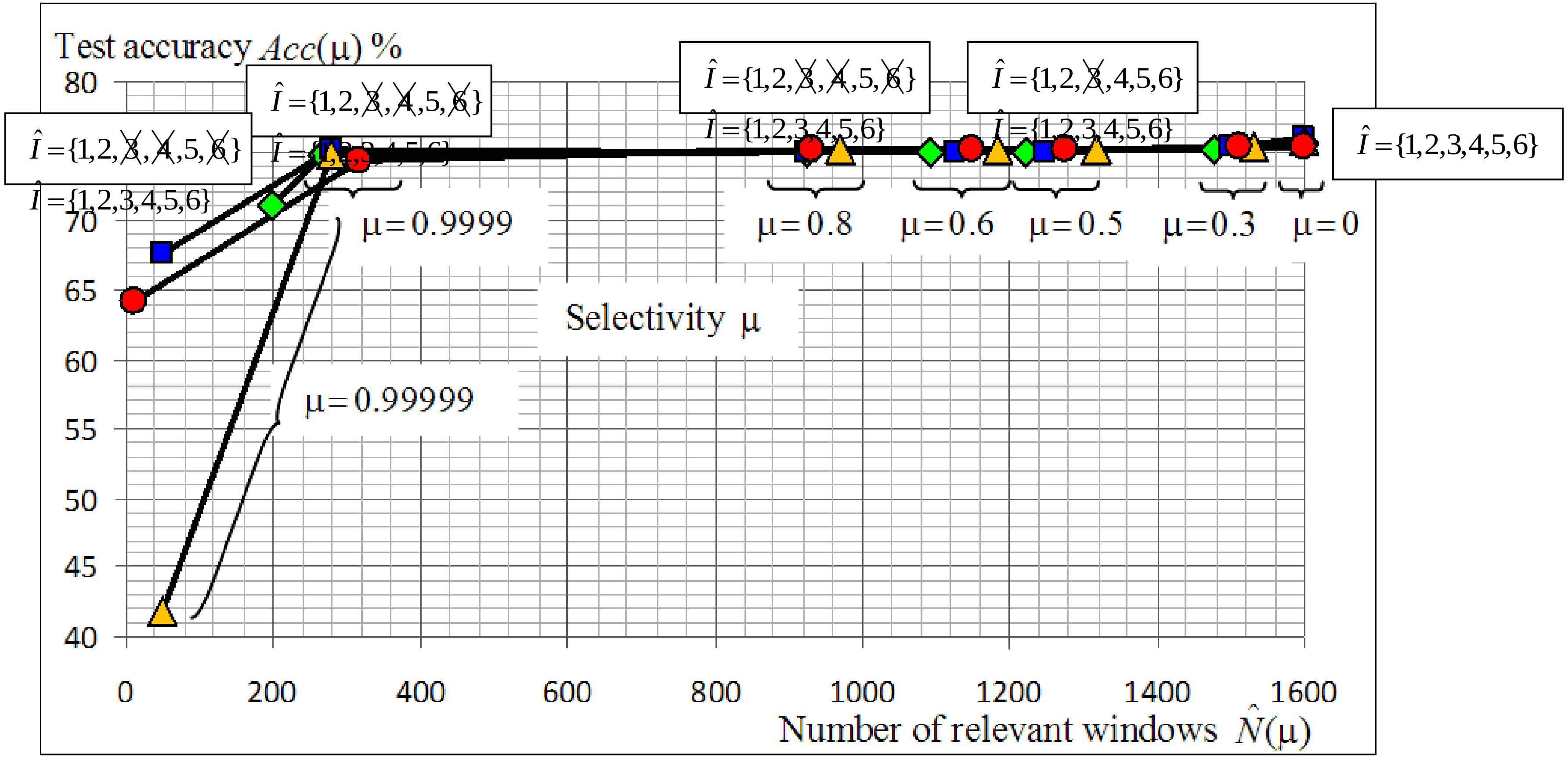


Figure 1. Experimental dependence of the number of relevant amino acid fragments $\hat{N}$ and the test-set accuracy of detecting strands Acc on the level of secondary feature selectivity μ.

Частный случай: Метрика как функция попарного сравнительного представления объектов

Метрика на множестве объектов Ω: $\rho(\omega',\omega'')\geq 0,\ \ \rho(\omega',\omega''')\leq\rho(\omega',\omega'')+\rho(\omega'',\omega''')$

Функция попарного сравнения: $S(\omega',\omega'')=S(\omega'',\omega')=\rho(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}$

Обучающая совокупность: $\Omega^*=\left\{\omega_j,\ j=1,...,N\right\}$: $\left\{\rho(\omega_j,\omega_l),\ y_j=y(\omega_j),\ j,l=1,...,N\right\}$

Вектор вторичных признаков объекта $\omega\in\Omega$ относительно обучающей совокупности:

$\mathbf{x}(\omega)=\left(x_k(\omega)=\rho(\omega_k,\omega),\ k=1,...,N\right)\in\mathbb{R}^N$

Классический критерий SVM в линейном пространстве метрических признаков:

$$\begin{cases}\sum_{k=1}^N a_k^2+C\sum_{j=1}^N\delta_j\to\min(a_1,...,a_N,b,\delta_1,...,\delta_N),\\ y_j\left(\sum_{k=1}^N a_k\rho(\omega_k,\omega_j)+b\right)\geq 1-\delta_j,\ \delta_j\geq 0,\ j=1,...,N.\end{cases}$$

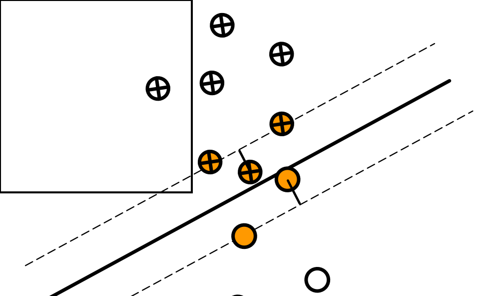
Результат обучения: Дискриминантная функция, применимая к произвольному объекту

$$d(\omega)=\sum_{k=1}^N a_k\rho(\omega_k,\omega)+b\gtrless 0$$

Принципиально новое обстоятельство – базисная совокупность $\Omega^*=\left\{\omega_j,\ j=1,...,N\right\}$ снабжена метрикой.

Каждый коэффициент a_k соответствует объекту базисной совокупности, причем среди них разные пары по-разному отличаются друг от друга $\rho(\omega_k,\omega_l)$.

Естественное дополнительное требование:
Если $\rho(\omega_k,\omega_l)\to 0$, то $(a_k-a_l)^2\to 0$.



Регуляризованный критерий обучения в метрическом пространстве объектов

Исходный критерий обучения:	Критерий обучения с ***метрической регуляризацией***:
$\begin{cases} \sum_{k=1}^{N} a_k^2 + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(a_k, b, \delta_j), \\ y_j\left(\sum_{k=1}^{N} a_k\rho(\omega_k,\omega_j)+b\right) \geq 1-\delta_j, \\ \delta_j \geq 0,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$	$\begin{cases} \sum_{k=1}^{N^0} a_k^2 + \boxed{\sum_{k=1}^{N^0}\sum_{l=1}^{N^0}\eta(\omega_k,\omega_l)(a_k-a_l)^2} + C\sum_{j=1}^{N}\delta_j \to \min(a_k, b, \delta_j), \\ y_j\left(\sum_{k=1}^{N^0} a_k\rho(\omega_k,\omega_j)+b\right) \geq 1-\delta_j,\quad \delta_j \geq 0,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$

Здесь $\eta(\omega_k,\omega_l) \geq 0$ –убывающая функция значения метрики $\rho(\omega_k,\omega_l)$. Например:

$\eta(\omega_k,\omega_l\,|\,\beta,c)=\beta\big/\left[1+c\rho^m(\omega_k,\omega_l)\right]$ $\quad\eta(\omega_k,\omega_l\,|\,\beta,c)=\beta\exp\left(-c\rho^m(\omega_k,\omega_l)\right)$ $\quad\eta(\omega_k,\omega_l)=1/\rho(\omega_k,\omega_l)$