ДИАГНОСТИКА СФЕРОЙ*

В. А. Бондарко

vbondarko@gmail.com

13 апреля 2022 г.

Аннотация

Это сообщение продолжает сделанный ранее доклад [1] в котором был описан алгоритм ЯВА. Алгоритм ЯВА позволяет найти гиперплоскость, разделяющую два конечных множества точек, если таковая вообще существует. В настоящем докладе будет рассмотрена задача разделения множеств посредством сферы. Она будет сведена к предыдущей, что и позволит воспользоваться для ее решения тем же алгоритмом.

1°. Заданы точки

$$x_j \in \mathbb{R}^n,\ j = 1, 2, \dots M, \qquad y_k \in \mathbb{R}^n,\ k = 1, 2, \dots L.$$

Требуется построить такую сферу $S = \{s : |s - \tau| = R\}$, чтобы все x_j оказались снаружи, а y_k — внутри:

$$|x_j - \tau|^2 > R^2, \qquad |y_k - \tau|^2 < R^2 \tag{1}$$

Покажем, что эта задача эквивалентна некоторой системе неравенств вида $\alpha_t - \langle \varphi_t, \tau \rangle < 0,\ t = 1, 2, \dots$ относительно центра искомой окружности, т. е. вектора τ.

Зациклим неравенства (1) в две бесконечные серии:

$$R^2 - \left|x_{j(t)}\right|^2 - |\tau|^2 + 2\left\langle x_{j(t)}, \tau \right\rangle < 0, \tag{2}$$

$$\left|y_{k(t)}\right|^2 + |\tau|^2 - 2\left\langle y_{k(t)}, \tau \right\rangle - R^2 < 0, \tag{3}$$

где $t = 1, 2, \dots,\ j(t) = (t \div L + 1) \pmod M + 1,\ k(t) = t \pmod L + 1,\ t \div M$ — результат от деления t на M нацело. Сложив неравенства (2) и (3), получаем бесконечную систему неравенств

$$\alpha_t - \langle \varphi_t, \tau \rangle < 0,\ t = 1, 2, \dots, \tag{4}$$

где $\alpha_t = \left|y_{k(t)}\right|^2 - \left|x_{j(t)}\right|^2$, $\varphi_t = 2\left[y_{k(t)} - x_{j(t)}\right]$.

*Семинар по оптимизации, машинному обучению и искусственному интеллекту «O&ML» http://www.apmath.spbu.ru/oml/

Итак, если пара τ, R (центр и радиус) — решение неравенств (1), то τ удовлетворяет неравенствам (4). Предположим теперь, что τ — некоторое решение неравенств (4), то есть

$$|y_k|^2 - |x_j|^2 - 2\langle y_k - x_j, \tau\rangle < 0$$

для всех j и k (именно для всех, поскольку нумерация $j(t)$ и $k(t)$ специально определена подходящим для этого способом). Таким образом,

$$|y_k|^2 - 2\langle y_k, \tau\rangle < |x_j|^2 - 2\langle x_j, \tau\rangle \quad \forall\ j, k.$$

Добавив $|\tau|^2$ к левым и правым частям этих неравенств, получаем

$$|y_k - \tau|^2 < |x_j - \tau|^2$$

для всех j и k, то есть в частности и для тех, на которых достигаются

$$\hat{\rho} := \max_k |y_k - \tau|^2, \qquad \check{\rho} := \min_j |x_j - \tau|^2,$$

причем $\hat{\rho} < \check{\rho}$. Положив

$$R := \sqrt{\frac{\hat{\rho} + \check{\rho}}{2}}, \tag{5}$$

получаем неравенства (1).

Таким образом, если разделяющая классы $X = \{x_j\}$ и $Y = \{y_k\}$ сфера существует, то для ее центра τ справедливы неравенства (4). И наоборот, если вектор τ — решение неравенств (4), то сфера с центром τ и радиусом (5) разделяет классы X и Y.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Сфера с центром τ и радиусом (5) разделяет классы X и Y с запасом $\varepsilon \geqslant 0$, если выполнены усиленные неравенства (1):

$$|x_j - \tau|^2 > R^2 + \varepsilon, \qquad |y_k - \tau|^2 < R^2.$$

Для решения неравенств (4) или установления их неразрешимости можно применить алгоритм ЯВА:

$$\tau_{t+1} = \begin{cases} \tau_t, \ \text{ если } h_t < 0, \\ \\ \tau_t + \mu_t \dfrac{h_t + \varepsilon}{|\varphi_t|^2}\varphi_t, \ \text{ если } h_t \geqslant 0, \end{cases} \tag{6}$$

$$S_1 = 0,\ S_{t+1} = S_t + s_t,\ s_t = \begin{cases} (2\mu_t - \mu_t^2)\dfrac{[h_t + \varepsilon]^2}{|\varphi_t|^2}, \text{ если } h_t \geqslant 0, \\ \\ 0, \text{ если } h_t < 0, \end{cases} \tag{7}$$

где $t = 1, 2, \ldots$, $h_t := \alpha_t - \langle \varphi_t, \tau_t\rangle$, а μ_t и $\varepsilon > 0$ — параметры алгоритма.

Еще один параметр, $\mathcal{R} > 0$, фигурирует в **правиле останова**:

Вариант 1. Если неравенства $h_t < 0$ выполнены ML раз подряд, то алгоритм останавливается с итоговым вектором τ_t, который задает координаты центра разделяющей сферы.

Вариант 2. Если при некотором t значение S_t превысило $(|\tau_1| + \mathcal{R})^2$, то алгоритм останавливается с итоговым выводом, что разделение классов невозможно.

Алгоритм ЯВА выписан здесь в чуть более общем виде, чем это было сделано в докладе о диагностике гиперплоскостями. Самый общий вид этого алгоритма приведен в монографии [2], там же имеются ссылки на более ранние публикации об алгоритмах этого типа. Теорема о сходимости и правиле останова алгоритма ЯВА в контексте задачи о диагностике остается справедливой после незначительной коррекции:

ТЕОРЕМА.[1] *Пусть значения μ_t выбираются произвольно из отрезка $[\mu', \mu'']$, $0 < \mu' < \mu'' < 2$, а положительные параметры $\mathcal{R}$ и ε фиксированы. Тогда алгоритм (6),(7) остановится через конечное число шагов по одному из вариантов правила останова. Если остановка в момент t происходит по варианту 1, то сфера с центром τ_t и радиусом (5) разделяет классы X и Y с запасом $(\hat{\rho} + \check{\rho})/2$. Если остановка в момент t происходит по варианту 2, то разделение классов сферой с центром в шаре $\|\tau\| \leqslant \mathcal{R}$ и запасом ε невозможно.*

Доказательство. Предположим сначала, что, вопреки теореме, количество коррекций вектора τ_t бесконечно. В соответствии с правилом останова такое возможно только в случае, если не выполняется условие останова по варианту 2, то есть $S_t \leqslant (|\tau_1| + \mathcal{R})^2 \; \forall t$. Отсюда следует сходимость ряда $\sum\limits_{t:\, h_t \geqslant 0} s_t$, частными суммами которого служат величины S_t. У сходящегося ряда общий член стремится к нулю. Следовательно, $h_t + \varepsilon \to 0$ при $t \to \infty$, $h_t \geqslant 0$. Таким образом, при достаточно больших t либо $h_t < 0$, либо $h_t \geqslant 0$ и $h_t + \varepsilon/2 < 0$, то есть в любом случае $h_t < 0$. Отсюда вытекает, что выполнено условие останова по варианту 1, что противоречит сделанному предположению. Итак, наш алгоритм остановится через конечное число шагов.

Останов алгоритма по варианту 1 в силу периодичности последовательностей $\{\alpha_t\}$ и $\{\varphi_t\}$ означает, что полученный вектор τ_t служит решением неравенств (4). Следовательно, сфера с центром τ_t и радиусом (5) разделяет классы X и Y с запасом $(\hat{\rho} + \check{\rho})/2$, то есть заключение теоремы в этом случае

[1] Теорема о сходимости частного случая алгоритма ЯВА сформулирована и доказана в предыдущем докладе.

справедливо. Если же останов произошел по варианту 2, то имеются две возможности — разделение классов сферой с центром в шаре $\|\tau\| \leqslant \mathcal{R}$ и запасом ε невозможно либо возможно. В первом случае заключение теоремы опять-таки справедливо. Покажем, что второй случай исключается. Тем самым теорема будет полностью доказана.

Пусть, вопреки предположению, останов происходит по варианту 2 в момент $t = T$, то есть

$$S_T > (|\tau_1| + \mathcal{R})^2, \tag{8}$$

и существует вектор τ_*, для которого неравенство (4) выполнено с запасом ε:

$$\overline{h}_t := \alpha_t - \langle \varphi_t, \tau_* \rangle < -\varepsilon < 0 \;\; \forall\, t. \tag{9}$$

Пусть в некоторый момент t неравенство (4) для $\tau = \tau_t$ нарушено:

$$h_t = \alpha_t - \langle \varphi_t, \tau_t \rangle \geqslant 0. \tag{10}$$

Тогда

$$d_t := V(\tau_t) - V(\tau_{t+1}) = |\tau_t - \tau_*|^2 - |\tau_{t+1} - \tau_*|^2 = \langle \tau_t - \tau_{t+1}, \tau_t + \tau_{t+1} - 2\tau_* \rangle .$$

Учитывая, что $\tau_t + \tau_{t+1} = 2\tau_t - (\tau_t - \tau_{t+1})$, получаем

$$\begin{aligned}
d_t &= - |\tau_t - \tau_{t+1}|^2 + 2 \langle \tau_t - \tau_{t+1}, \tau_t \rangle - 2 \langle \tau_t - \tau_{t+1}, \tau_* \rangle = \\
&= - \mu_t^2 \frac{[h_t + \varepsilon]^2}{|\varphi_t|^2} + 2\mu_t \frac{[h_t + \varepsilon]}{|\varphi_t|^2} \left(- \langle \tau_t, \varphi_t \rangle + \alpha_t + \varepsilon - \alpha_t - \varepsilon \right) + \\
&\quad + 2\mu_t \frac{[h_t + \varepsilon]}{|\varphi_t|^2} \langle \tau_*, \varphi_t \rangle = \\
&= \left(2\mu_t - \mu_t^2\right) \frac{[h_t + \varepsilon]^2}{|\varphi_t|^2} - 2\mu_t \frac{[h_t + \varepsilon]}{|\varphi_t|^2} \left[\, \overline{h}_t + \varepsilon \right] > \left(2\mu_t - \mu_t^2\right) \frac{[h_t + \varepsilon]^2}{|\varphi_t|^2} = s_t,
\end{aligned}$$

поскольку знак второго слагаемого определяется неравенствами (9) и (10). Таким образом,

$$d_t > s_t > 2\mu'(1 - \mu'')\varepsilon^2 / \max_t |\varphi_t|^2 . \tag{11}$$

Значения $V(\tau)$ неотрицательны, поэтому

$$V(\tau_1) \geqslant V(\tau_1) - V(\tau_T) = \sum_{t=1}^{T} d_t > \sum_{t=1}^{T} s_t = S_T.$$

Следовательно, $S_T < V(\tau_1) = |\tau_1 - \tau_*|^2 < (|\tau_1| + |\tau_*|)^2 < (|\tau_1| + \mathcal{R})^2$, что противоречит условию (8). $\square$

2°. Рассмотрим примеры работы алгоритма. На левом поле каждого рисунка изображены результаты применения алгоритма (если они есть). На правом поле зеленым цветом показана траектория оценок τ_t. При построении этих траекторий использованы параметры $\varepsilon = 1/2,\ \mu_t = 1.8$.

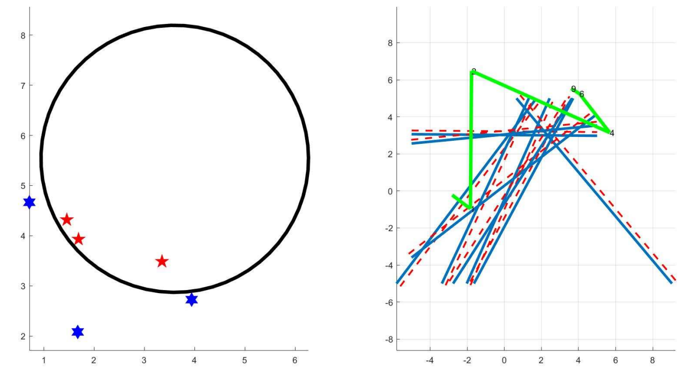

Рис. 1. Успешное разделение классов X и Y

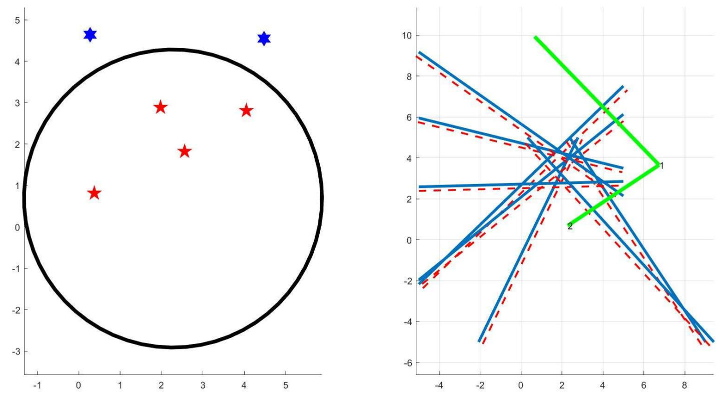

Рис. 2. Успешное разделение классов X и Y

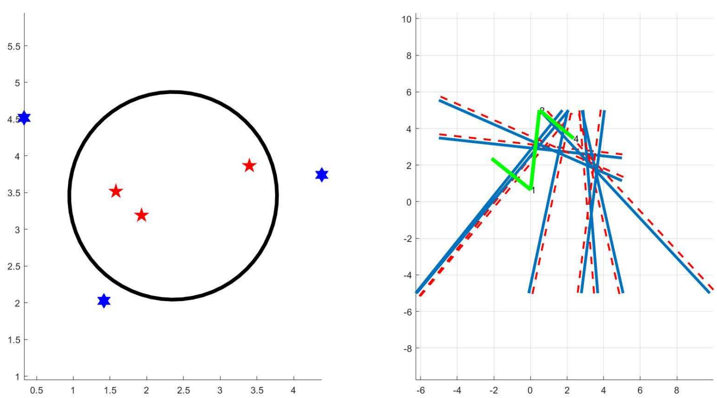

Рис. 3. Успешное разделение классов X и Y

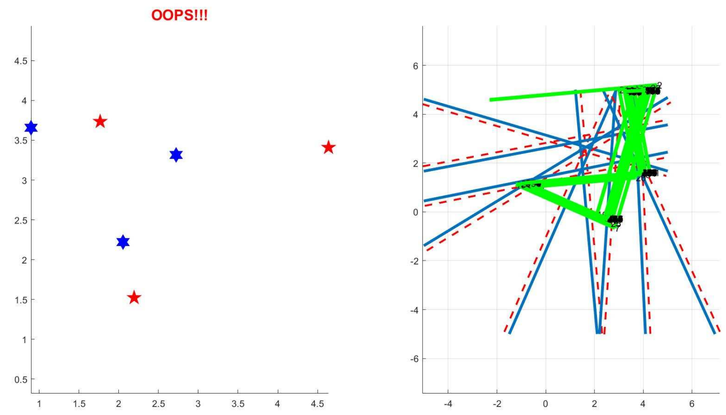

Рис. 4. Разделение классов X и Y с запасом $1/2$ невозможно

3°. Разумеется, на сфере свет клином не сошелся. Классы можно разделять любыми поверхностями второго порядка, или любого порядка, или вообще выбрать в качестве регрессоров любые функции. Единственное затруднение заключается в том, что характеристики полученной поверхности априорно не ясны. Например, для поверхностей второго порядка при одном и том же наборе представителей классов можно в качестве разделяющей поверхности получить как поверхность эллипса, так и гиперболу:

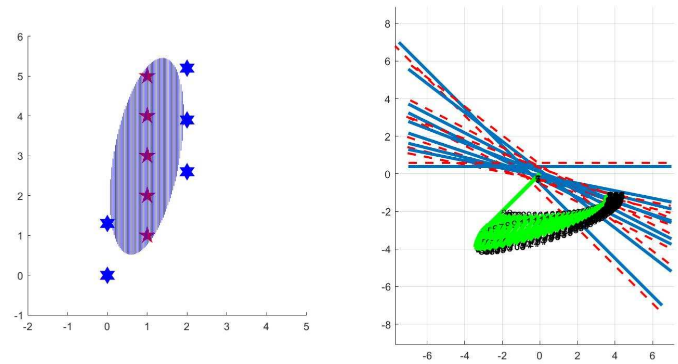

Рис. 5. Разделение эллипсом

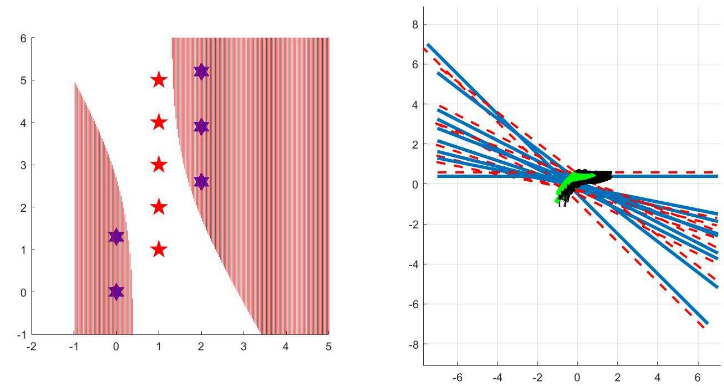

Рис. 6. Разделение гиперболой

Результат зависит от начальных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бондарко В. А. *Конечно-сходящиеся алгоритмы в математической диагностике* // Семинар «O&ML». Избранные доклады. 2 марта 2022 г. (`http://www.apmath.spbu.ru/oml/reps22.shtml#0302`)

2. Фомин В. Н. Математическая теория обучаемых опознающих систем. Л.: Изд-во ЛГУ, 1976, 236 с.