Лекція 12. Метод потенціальних функцій

12.1. Статистична інтерпретація

Ідея методу потенціальних функцій має фізичну природу. Як відомо, згідно закону Кулона вплив заряду на точку убуває пропорційно квадрату відстані до неї. Отже, потенціал може використовуватися як оцінка віддаленості точки від заряду. У цьому розумінні метод потенціальних функцій є різновидом методу найближчого сусіди. Якщо поле утворене декількома зарядами, потенціал у кожній точці поля дорівнює сумі потенціалів, створюваних у цій точці кожним із зарядів. Якщо заряди, що утворюють поле, розташовані компактно, потенціал поля досягає максимального значення в центрі тяжіння множини точок і убуває в міру видалення від нього. Таким чином, якщо точку в просторі ознак інтерпретувати як заряд, то ці міркування можна формалізувати і звести до обчислення певної суми функцій, що описують потенціали зарядів — точок навчальної множини.

Розглянемо задачу бінарної класифікації. Кожному образу поставимо у однозначну відповідність точку в просторі ознак X. В подальшому будемо припускати, що класи K_1 і K_2 не перетинаються. Як правило, топологічні властивості простору ознак допускають застосування малої леми Урисона, з якої випливає, що в просторі ознак X існує неперервна функція Φ, яка набуває значення більше нуля в точках класу K_1 і менше нуля в точках класу K_2. Зауважимо, що таких функцій може бути багато (і навіть нескінченно багато).

В ході навчання для кожного образу R_k, якому відповідає точка x_k, обчислюється функція $U(x, x_k)$, яка називається *потенціальною*, а побудова роздільної функції Φ за навчальною послідовністю образів $A_1, A_2, ..., A_k, ...$ зводиться до побудови послідовності потенціальних функцій $U(x, x_1), U(x, x_2), ..., U(x, x_k), ...$, що збігаються до функції Φ.

Метод потенціальних функцій грунтується на припущенні, що існує система функцій $\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_k, ...$, яка дозволяє для будь-яких двох диз'юнктних класів знайти таке число N, що функцію Φ можна подати у вигляді

$$\Phi(x) = \sum_{k=1}^{N} c_k \varphi_k(x). \qquad (1)$$

Як правило простір X є гільбертовим, тому в новому просторі існує повна система функцій $\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_k, ...$, за допомогою яких функцію Φ можна подати у вигляді ряду Фур'є

$$\Phi(x) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \varphi_k(x) \qquad (2)$$

Прагнучи подати роздільчу функцію Φ у вигляді суми (а не ряду), уведемо в розгляд N-вимірний простір Y, на який простір ознак X відображається за правилом $y_k = \varphi_k(x), k = 1, 2, ..., N$.

Таким чином, роздільча функція Φ відображається в лінійну функцію $\sum_{k=1}^{N} a_k y_k(x)$ і набуває значення більше нуля в точках класу K_1 і менше нуля в точках класу K_2. Легко бачити, що в просторі Y функція Φ є лінійною (відносно точок y).

Потенціальна функція розглядається як функція двох векторів

$$\Phi(x)=\sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k^2\varphi_k(x)\varphi_k\left(x^*\right) \tag{3}$$

де $\varphi_1,\varphi_2,...,\varphi_k,...$ — лінійно-незалежна система функцій; α_k^2 — дійсні числа, що не обертаються в нуль одночасно; x^* — точка, яка обчислюється в ході навчання.

Вважатимемо, що функції φ_k і $U\left(x,x^*\right)$ обмежені на просторі ознак. Першому образу P_1 ставимо у відповідність точку ознак x_1, за якою будується потенційна функція

$$\Phi_1(x)=\begin{cases}U(x,x_1), & \text{якщо } x\in K_1,\\ -U(x,x_1), & \text{якщо } x\in K_2.\end{cases} \tag{4}$$

На k-му кроці отримуємо потенціальну функцію Φ_k.

На (k+1)-му кроці, обчислюючи потенціал в точці x_{k+1} можемо отримати наступні значення потенціалу:

1. $x_{k+1}\in K_1 \Rightarrow \Phi_k(x_{k+1})>0 \Rightarrow \Phi_{k+1}(x)=\Phi_k(x)$,
2. $x_{k+1}\in K_2 \Rightarrow \Phi_k(x_{k+1})<0 \Rightarrow \Phi_{k+1}(x)=\Phi_k(x)$,
3. $x_{k+1}\in K_1 \Rightarrow \Phi_k(x_{k+1})<0 \Rightarrow \Phi_{k+1}(x)=\Phi_k(x)+\Phi(x,x_{k+1})$,
4. $x_{k+1}\in K_2 \Rightarrow \Phi_k(x_{k+1})>0 \Rightarrow \Phi_{k+1}(x)=\Phi_k(x)-\Phi(x,x_{k+1})$.

Таким чином,

$$\Phi_k(x)=\sum_{x_i^-\in V_1}U(x,x_i)+\sum_{x_j^+\in V_2}U\left(x,x_j\right), \tag{5}$$

де x_i^- — точки з класу K_1, на яких класифікатор робить помилку.

Корекцію роздільної функції можна здійснювати по-різному, тому існують декілька алгоритмів, заснованих на методі потенціальних функцій.

Варіант 1. Вважатимемо, що істинне значення функції $\Phi_{k+1}(x)$ в точці x_{k+1} відомо заздалегідь. Тоді корекцію роздільної функції можна здійснити так:

$$\Phi_{k+1}(x)=\Phi_k(x)+\alpha_{k+1}\operatorname{sgn}\left[\Phi(x_{k+1})-\Phi_k(x_{k+1})\right]U(x,x_{k+1}) \tag{6}$$

где $\Phi(x_{k+1})$ — істинне значення роздільної функції в точці x_{k+1}; α_k — будь-яка послідовність чисел, що задовольняє умовам:

$$\alpha_k\to 0,\ \sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k=\infty,\ \sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k^2<\infty.$$

Інакше кажучи, $\{\alpha_k\}\in(c_0\cap l_2)\setminus l_1$.

Теорема 1. Нехай x_k — послідовність незалежних випадкових точок з простору ознак X, $P(x_i)$ — ймовірність появи точки x_i, а $\Phi(x)$ — функція, що має вигляд $\Phi(x)=\sum_{k=1}^{N}c_k\varphi_k(x)$. Тоді послідовність функцій $\Phi_k(x), k=1,2,...$, що задаються рекурентними співвідношеннями (6) задовольняють умову

$$P\left\{\lim_{k\to\infty}\int_X\left|\Phi(x)-\Phi_i(x)\right|P(x)dx=0\right\}=1. \tag{7}$$

Варіант 2. Другий варіант виглядає так.

$\Phi_0(x)=0$,

$$\Phi_{k+1}(x)=\Phi_k(x)+\frac{1}{\lambda}\left[\Phi(x_{k+1})-\Phi_k(x_{k+1})\right]U(x,x_{k+1}) \tag{8}$$

де

$$\lambda=\frac{1}{2}\max U\left(x,x^*\right)$$

Теорема 2. За умов теореми 1 послідовність функцій $\Phi_k(x), k=1,2,\ldots$, що визначаються співвідношенням (8) задовольняє умову

$$P\left\{\lim_{k\to\infty}\int_X\left(\Phi(x)-\Phi_i(x)\right)^2 P(x)dx=0\right\}=1. \tag{9}$$

Ті ж формули можна використати для послідовного наближення коефіцієнтів c_k в поданні (1).

Варіант 1.

$$c_k^{(n+1)}=c_{k+1}^{(n)}+\alpha_{k+1}\operatorname{sgn}\left[\Phi(x_{k+1})-\sum_{k=1}^{N}c_k\varphi_k(x_{k+1})\right]\varphi_k(x_{k+1}),\ i=1,2,\ldots,n$$

Варіант 2.

$$c_{k+1}^{(n+1)}=c_{k+1}^{(n)}+\frac{1}{\lambda}\left[\Phi(x_{k+1})-\sum_{k=1}^{N}c_k\varphi_k(x_{k+1})\right]\varphi_k(x_{k+1}),\ i=1,2,\ldots,n$$

12.2. Геометрична інтерпретація

Нехай в просторі X існує функція $\Phi(x)$, що розділяє множини $A\subset K_1$ і $B\subset K_2$ і задовольняє умови (1) і (2). Тоді в просторі Y існує роздільна площина Γ, що проходить через початок координат із направляючим вектором $\vec{c}$. Відобразимо множину A симетрично відносно початку координат у множину B (тобто замінимо кожний вектор x вектором $-x$) і отримаємо множину $S=A\bigcup B'$. За припущенням множини A і B' розділяються площиною Γ, тобто множина S лежить по один бік від площини Γ. Розглянемо послідовності точок $M=\{x_1,x_2,\ldots,x_n,\ldots\}$ з простору X і їх образи $M^*=\{y_1,y_2,\ldots,y_n,\ldots\}$ в просторі Y.

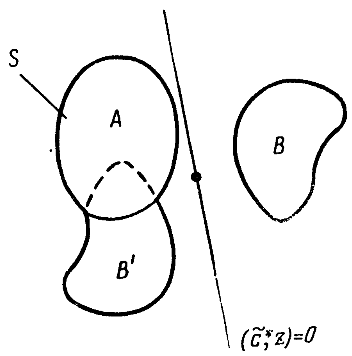

Рис. 1. Роздільна площина [1]

Потенціальна функція у просторі Y може бути подана як

$$U\left(Z,Z^*\right)=ZZ^*, \tag{10}$$

де $Z=\{z_1,z_2,\ldots\}=\{\alpha_1\varphi_1(x),\alpha_2\varphi_2(x),\ldots\}$ і $Z^*=\left\{z_1^*,z_2^*,\ldots\right\}=\left\{\alpha_1\varphi_1\left(x^*\right),\alpha_2\varphi_2\left(x^*\right),\ldots\right\}$.

Отже, співвідношення (5) можна переписати як

$$\Phi_k(Z) = \sum_{Z^{p(-)} \in M^*} \left(Z, Z^p\right) \tag{11}$$

Виправлення помилки відбувається тоді, коли $\Phi_k(Z) < 0$. Отже, корекція помилки на (k+1)-му кроці відбувається, коли

$$z_{k+1} \sum_{m=1}^{k} z_m < 0 \,. \tag{12}$$

Таким чином, перша точка $Z^{(1)}$ із множини M^* призводить до побудови площини $U_1(Z) = \left(Z, Z^1\right) = 0$ із напрямляючим вектором $Z^{(1)}$. Якщо наступна точка з множини M^* лежить у тому ж підпросторі, що й напрямляючий вектор Z^1, то помилка відсутня і роздільна площина не уточнюється. Якщо ж наступна точка потрапляє у протилежний підпростір, відбувається корекція. При цьому попередній напрямляючий вектор складається із вектором точки, що вимагала корекції, і їхня сума береться як новий напрямляючий вектор.

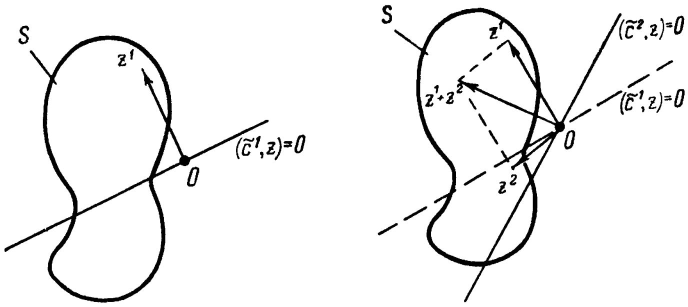

Рис. 2. Корекція роздільної площини [1]

Після k корекцій напрямляючий вектор дорівнює $\sum_{m=1}^{k} Z_m$ і площина, що проходить через початок координат, приймається як роздільна.

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