

ГИПЕРПЛОСКОСТИ В «МНОЖЕСТВАХ И РАССТОЯНИЯХ СООТВЕТСТВИЯ»: КЛАСТЕРИЗАЦИЯ

Николай Кириченко, Владимир Донченко

Аннотация: Рассматриваются общие проблемы кластеризации. Предложена концепция «множеств» и «расстояний соответствия» в построении кластеров, рассмотрены модели кластеризации, в которых «множествами соответствия» являются гиперплоскости, а «расстояниями соответствия» – различные варианты расстояний в связи с соответствующими гиперплоскостями. Развита аппарат псевдообращения по Муру – Пенроузу: приведены рекуррентные формулы возмущения для ортогональных проекторов и R -операторов, связанных с псевдообращением. Рекуррентные формулы возмущения использованы для построения алгебраического варианта Jack Knife'a. Приведена сборка важных для приложений результатов, касающихся псевдообращения.

Ключевые слова: кластеризация, кластеризация по гиперплоскостям, псевдообращение по Муру - Пенроузу, сингулярное представление (SVD), ортогональные проекторы, псевдообращение для возмущённых матриц, преобразование Хока.

ACM Classification Keywords: G.3 Probability and statistics, G.1.6. Numerical analysis: Optimization; G.2.m. Discrete mathematics: miscellaneous.

Вступление

Статья посвящена алгебраическим аспектам задачи кластеризации (см., например, [Kohonen, 2001]) как задачи группирования информации. В дальнейшем будет обсуждаться вопрос о разбиении имеющихся элементов на два класса с тем, что процедуру такого разбиения можно запускать рекуррентно.

Важным, как представляется авторам, во всех методах кластеризации является представление о «множествах соответствия» и «расстояниях соответствия». Типичным представителем первых являются прототипы-представители (prototypes) классов в методе k -средних. Что касается «расстояний соответствия», то, это меры соответствия «множествам соответствия», в соответствии с которыми элемент относят к тому или иному классу: как правило, – по минимальному значению «расстояния». Как правило, такими расстояниями соответствия являются, евклидовы расстояния в соответствующих пространствах признаков.

Заметим также, что процедуры кластеризации построены на применении стандартной рекуррентной процедуры: последовательного объединения (merging), разбиения (splitting) или уточняющих друг друга разбиений.

Разделяют также процедуры кластеризации с учителем (обучение с учителем – supervised learning) и – без учителя (unsupervised learning). В первом случае имеющиеся элементы уже разделены на классы, во втором – следует выделить классы на основе анализа внутренней структуры совокупности $x(1), \dots, x(n)$ векторов из пространства признаков R^m

В задачах кластеризации следует также выделять этап обучения: построения соответствующих классов-кластеров (этап обучения), и этап использования построенного разбиения: отнесения каждого нового вектора признаков к одному из построенных классов.

В предлагаемой вниманию читателю работе речь идёт об использовании гиперплоскостей в качестве «множеств соответствия», о «расстояниях соответствия», построенным в связи с гиперплоскостями, а также об обеспечении рекуррентности применения процедуры обучения без учителя; о согласованности обучения с учителем и без него; об аппарате псевдообращения по Муру – Пенроузу ([Moore,1920], [Penrose,1955]); о важном продвижении и расширении возможностей аппарата псевдообращения: о теории возмущения псевдообратных матриц ([Кириченко, 1997]), а также – о её совершенствовании и применении в задачах кластеризации (см. также [Кириченко, Донченко, 2007 а),b])). Заметим, что важные примеры применения теории псевдообращения к исследованию классических прикладных задач, отличных от задач кластеризации, можно найти в работах [Кириченко, Лепеха, 2002], [Кириченко, Донченко, 2005] .

Заметим также, что важными вехами в развитии аппарата псевдообращения, в частности, в обеспечении эффективности построения соответствующих рекуррентных процедур и вычисления расстояний соответствия в них, – являются: прямые [Алберт, 1977] и обратные [Кириченко, 1997] формулы Гревилля; формулы псевдообращения для замены строки или столбца матрицы [Кириченко, Лепеха, 2002,], [Кириченко, Донченко, 2005]; также формулы возмущения для Z - и R -операторов [Кириченко, Донченко., 2007 b)]. Отметим также, что задача кластеризации по гиперплоскостям, порождённым пространствами значений подходящих аффинных операторов, как вариант применения преобразования Хока, рассматривалась в работе [Donchenko, 2003].

В первой части предлагаемой работы приводится подборка результатов, важных в технике применения аппарата псевдообращения.

Во второй части рассматривается собственно задача кластеризации: рассматриваются подходящие гиперплоскости в качестве «множеств соответствия», строятся подходящие «расстояния соответствия» в связи с введёнными в рассмотрение гиперплоскостями, рассматриваются проблема обеспечения рекуррентности в вычислении «расстояний соответствия» как внутри рекуррентного шага, так и между разными шагами.

Отметим, что аппарат псевдообращения позволяет выписывать явные формулы, как для «расстояний соответствия», так и явно описывать «множества соответствия» в терминах смещения и явного описания ортогональных проекторов соответствующих линейных подпространств (ср. с вычислительными процедурами [Varnik,1998] для статистических вариантов кластеризации на основе ковариационных). Вычислительные алгоритмы для расстояния от гиперплоскостей использовались, к примеру, также в работе [Найкин,1999].

Постановка задачи

Собственно, использование гиперплоскостей как аппарата решения задач группирования информации в статистической постановке, восходит к методу главных компонент: [Pearson , 1901] (другие названия метод Хётеллинга (*Hotelling*), метод Карунена-Лоева (*Karhunen-Loeve*)) и имеет в основе идею такого ортогонального преобразования имеющегося набора случайных величин, которое бы приводило матрицу ковариаций к главным осям. Ещё раз обратим внимание читателя на специфически статистический вариант постановки и применения метода кластеризации в виде метода главных компонент, связанный с анализом естественного матричного объекта, каковым является матрица ковариаций, и применению классического результата Сильвестра [Sylvester, 1889]. Псевдообращение позволяет анализировать матрицы произвольной размерности, а не обязательно квадратные; позволяет эффективно строить ортогональные проекторы, отвечающие «естественным подпространствам» линейного оператора:

подпространству значений и ядру оператора; описывать гиперплоскости, отвечающие всем решениям системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), а также описывать необходимые и достаточные условия существования таких решений: описывать «наилучшие» приближенные решения (псевдорешения) СЛАУ; явно описывать невязку соответствующего приближения.

В последующем будем рассматривать задачу кластеризации в обучении без учителя для дихотомического варианта постановки задачи: для разбиения имеющейся совокупности $x(1), \dots, x(n)$ векторов: из пространства признаков R^m на две части. В качестве множеств соответствия для каждого из классов-кластеров будут рассматриваться две гиперплоскости $\Gamma(k) \subseteq R^m, k = 1, 2$:

$\Gamma(k) = x_k + L_k \subseteq R^m, k = 1, 2$, x – будем называть смещение гиперплоскости, L – подпространством гиперплоскости. Таким образом, решение задачи кластеризации в такой постановке включает в себя

- построение «множеств соответствия» в виде гиперплоскостей: описание их смещений и соответствующих подпространств;
- описание «расстояний соответствия»;
- разбиение векторов $x(1), \dots, x(n)$ обучающей выборки на две части в соответствии с минимумом «расстояния соответствия» на две части:

$$x(i_1), \dots, x(i_{n_1}) \in \Gamma(1), \quad x(j_1), \dots, x(j_{n_2}) \in \Gamma(2) :$$

$$\{i_1, \dots, i_{n_1}\} \cup \{j_1, \dots, j_{n_2}\} = \{1, 2, \dots, n\}, \quad n_1 + n_2 = n ;$$

- построение решающего правила, в соответствии с которым следует относить объект, не представленный в выборке, к одному из двух классов.

Естественным для рекуррентной процедуры построения классов-кластеров является получение и использование результатов, обеспечивающих рекуррентность.

Заметим, что вариантом указанной задачи кластеризации является такой, в котором дополнительно фиксируется общая размерность s : $s < m$ гиперплоскостей $\Gamma(k) = x_k + L_k, k = 1, 2$.

Напомним, что «гиперплоскости соответствия» подлежат определению на основе внутренней структуры имеющегося набора векторов $x(1), \dots, x(n)$.

Вспомогательные определения и утверждения

Псевдообращение и сингулярное (SVD –) представление. Псевдообращение – обозначается A^+ – по Муру - Пенроузу ([Moore, 1920], Penrose, 1955], см. также [Алберт, 1977]) для $m \times n$ матрицы A может определяться одним из нескольких эквивалентных способов, среди которых отметим определение через сингулярное представление матриц (SVD-разложение), когда псевдообращение определяется соотношением:

$$A^+ = \sum_{i=1}^r x_i y_i^T \lambda_i^{-1}, \quad (1)$$

которое определяется элементами SVD-представления исходной матрицы:

$$A = \sum_{i=1}^r y_i x_i^T \lambda_i, \quad (2)$$

в котором: $\lambda_1^2 \geq \dots \lambda_r^2 > 0$ – общий набор ненулевых собственных чисел матриц $AA^T, A^T A$, $y_i, i = \overline{1, r}$ и $x_i, i = \overline{1, r}$, соответственно, – ортонормированные наборы собственных векторов этих матриц, а $r = \text{rank } A = \text{rank } A^T$.

Чаще всего сингулярное разложение матрицы A представляется в виде, определяемом следующей леммой.

Лемма 1. Для любой $m \times n$ матрицы A ранга r существуют $Y - m \times r$ и $X - r \times n$ с ортонормированными столбцами и строками соответственно, а также диагональная матрица $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r), \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_r > 0$ такие, что

$$A = Y \Lambda X. \quad (3)$$

Представление (2) является эквивалентным вариантом представления (3), если через $x_i, i = \overline{1, r}$ обозначить столбцы (ортонормированные) матрицы X , а через $y_i^T, i = \overline{1, r}$ – строки (ортонормированные) матрицы Y . В таких обозначениях справедлива следующая лемма.

Лемма 2. Произведение $Y \Lambda X$ матриц в (3) может быть представлено через «столбцовое» для Y и «строчное» для X представление может быть представлено в виде

$$X \Lambda Y = \sum_{i=1}^r y_i x_i^T \lambda_i.$$

Собственно, указанное несложное утверждение вытекает из того, что произведение BC двух матриц со «столбцовым» представлением для первой и «строчным» представлением для второй:

$$B = (b(1), b(2), \dots, b(p)), \quad C = (c(1), c(2), \dots, c(p))^T \quad (4)$$

допускает представление в виде

$$BC = (b(1), b(2), \dots, b(p))(c(1), c(2), \dots, c(p))^T = \sum_{i=1}^p b(i) c(i)^T \quad (5)$$

В дальнейшем представление (4) будет использоваться и для других матриц. При этом обозначение обозначения $b(i), c(i)^T, i = \overline{1, p}$, будут использоваться для обозначения соответственно строк и столбцов необходимых матриц.

Основные ортогональные проекторы: P-проекторы, Z-проекторы. Псевдообращение позволяет в явном виде выписать пару ортогональных проекторов (ОП), – обозначим их $P(A), P(A^T)$, и будем называть P - проекторами, – на подпространства $L(A^T), L(A)$ значений операторов A^T, A соответственно: $P(A) = A^+ A, P(A^T) = A^{T+} A^T = A A^+$. Ортогональные проекторы, которые будем обозначать $Z(A), Z(A^T)$ и называть Z - проекторами – определим соотношениями: $Z(A) = E_n - P(A), Z(A^T) = E_m - P(A^T)$ соответственно. Очевидным образом, Z - проекторы являются ортогональными проекторами на подпространства $L_{A^T}^\perp, L_A^\perp$, ортогональные к подпространствам $L(A^T), L(A)$ соответственно. Заметим, что $L_{A^T}^\perp = \text{Ker } A, L_A^\perp = \text{Ker } A^T$.

Соответственно, $Z(A), Z(A^T)$ являются ортогональными проекторами на подпространства нулей $\text{Ker}A, \text{Ker}A^T$ операторов A, A^T соответственно.

Замечание 1. Обратим внимание также на то, что каждое из подпространств $L(A), L(A^T)$ является линейной оболочкой соответственно векторов-столбцов и векторов-строк матрицы A .

R-операторы. Важными в связи с определением расстояний соответствия и рекуррентными формулами псевдообращения: формулами позволяющими записывать соответствующий оператор при добавлении или вычёркивании строки или столбца матрицы, – являются также операторы, которые будем называть R - операторы. Их будем определять соотношениями:

$$R(A) = A^+ A^{T+}, R(A^T) = A^{+T} A^+.$$

Важную роль в реализации аппарата псевдообращения в прикладных задачах играют прямые (см., например, [Алберт, 1977]) и обратные [Кириченко 1997] формулы Гревилля(Greville), а также формулы возмущения псевдообращения [Кириченко, 1997]. И в том и в другом случае речь идёт о формулах, связывающих псевдообращение преобразованной матрицы с псевдообращением исходной. В первом случае (прямых или обратных формулах Гревилля) речь идёт о преобразовании матрицы введением или вычёркиванием дополнительного строки или столбца. Во втором – о преобразовании исходной матрицы аддитивной добавкой ab^T . Таким образом, в формулах псевдообращения для возмущённых матриц речь идёт о выражении псевдообращения возмущённой матрицы $(A + ab^T)^+$ через A, A^+, a, b .

Прямые и обратные формулы Гревилля приведены ниже. Формулы возмущения псевдообращения можно найти в уже цитированной работе [Кириченко 1997]. Ниже приведены полученные на их основе формулы возмущения для Z - и R -операторов.

Заметим, что комбинация прямых и обратных формул Гревилля позволяет получить формулы псевдообращения при замене строки или столбца исходной матрицы. Соответствующие представления можно найти в работах [Кириченко, Лепеха, 2002], [Кириченко, Донченко, 2005]. Там же приведены формулы, определяющие вид, Z - и R - операторов при замене строки или столбца матрицы, для которой они рассматриваются.

Прямые формулы Гревилля (Greville).

Напомним, что прямые формулы Гревилля – это формулы, определяющие вид псевдообращения матрицы при её дополнении строкой или столбцом. Они определяются соотношениями, в которых используется блочное представление псевдообращения расширенной матрицы: через $P - m \times n$ - матрицу и, $q - n \times 1$ - вектор для расширения матрицы строкой

$$\begin{pmatrix} A \\ a^T \end{pmatrix}^+ = (P : q) \quad (6)$$

и через $Q - n \times m$ - матрицу и, $q - m \times 1$ - вектор

$$(A : a)^+ = \begin{pmatrix} Q \\ q^T \end{pmatrix} \quad (7)$$

при дополнении матрицы столбцом.

Замечание 2. Обратим внимание читателя, что вектор a в (6) и (7) имеет разные размерности: размерность $n \times 1$ в первом и $m \times 1$ во втором.

Теорема 1. (прямые формулы Greville– дополнение строкой). В представлении (6)

$$\begin{cases} P = (E - qa^T)A^+ \\ q = \begin{cases} \frac{Z(A)a}{a^T Z(A)a}, a^T Z(A)a > 0 \text{(нез.)} \\ \frac{R(A)a}{1 + a^T R(A)a}, a^T Z(A)a = 0 \text{(зав.)} \end{cases} \end{cases}, \quad (8)$$

Теорема 2. (прямые формулы Greville– дополнение столбцом) В представлении (7)

$$\begin{cases} Q = A^+ (E - aq^T) \\ q = \begin{cases} \frac{Z(A^T)a}{a^T Z(A^T)a}, a^T Z(A^T)a > 0 \text{(нез.)} \\ \frac{R(A^T)a}{1 + a^T R(A^T)a}, a^T Z(A^T)a = 0 \text{(зав.)} \end{cases} \end{cases}, \quad (9)$$

Замечание 3. Вид вектора q в прямых формулах Гревилля определяется линейной зависимостью вводимого вектора a^T или a от, соответственно, строк или столбцов матрицы A . Линейная независимость обеспечивается нулевым значением квадратичной формы (с соответствующей матрицей Z -оператором) на векторе a .

Обратные формулы Гревилля. Как и в прямых формулах Гревилля, вид выражений, связывающих псевдообращения исходной и преобразованной матрицы, выписывается в рамках блочного представлением (6) или (7), и так же – определяется линейной зависимостью или независимостью вычёркиваемой строки или столбца: сохранением или падением ранга преобразованной матрицы. Изменяется только вид соответствующего условия. Теперь условием независимости является условие $a^T q = 1$.

Теорема 3. (обратные формулы Гревилля – вычёркивание строки) В обозначениях (6) имеет место соотношение

$$A^+ = \begin{cases} \left(I_n - \frac{qq^T}{\|q\|^2} \right) P, a^T q = 1, \text{(нез.)}, & \text{ранг падает} \\ \left(I_n - \frac{qa^T}{1 - a^T q} \right) P, a^T q < 1 \text{(зав.)}, & \text{ранг сохраняется} \end{cases}. \quad (10)$$

Теорема 4. (обратные формулы Гревилля – вычёркивание столбца) В обозначениях (7) имеет место соотношение

$$A^+ = \begin{cases} Q \left(I_m - \frac{qq^T}{\|q\|^2} \right), a^T q = 1, (\text{нез.}), & \text{ранг падает} \\ Q \left(I_m - \frac{aq^T}{1 - a^T q} \right), a^T q < 1 (\text{зав.}), & \text{ранг сохраняется} \end{cases}.$$

Теорема 5 (формулы возмущения для Z- и R- операторов). При возмущении матрицы A матрицей $a \times b^T$ Z- и R- операторы для возмущённой матрицы определяются следующими соотношениями, вид которых определяется линейной зависимостью или независимостью векторов - составляющих возмущения от соответствующих составляющих матрицы A , а также от того, сохраняется или падает ранг возмущённой матрицы:

1) Для векторов a и b^T линейно не зависящих от, соответственно, столбцов и строк матрицы A , т.е. при выполнении условий $a^T Z(A^T)a > 0, b^T Z(A)b > 0$, справедливы следующие соотношения

$$Z(A + ab^T) = Z(A) + \frac{Z(A)bb^T Z(A)}{b^T Z(A)b};$$

$$Z((A + ab^T)^T) = Z(A^T + ba^T) = Z(A^T) + \frac{Z(A^T)aa^T Z(A^T)}{a^T Z(A^T)a};$$

$$R(A + ab^T) = R(A) - R(A) \frac{bb^T Z(A)}{b^T Z(A)b} - \frac{Z(A)bb^T}{b^T Z(A)b} R(A) - cA^+ ab^T Z(A) - cZ(A)ba^T A^{+T} +$$

$$+ \frac{A^+ aa^T A^{+T}}{a^T Z(A^T)a} + \frac{b^T R(A)ba^T Z(A^T)a + (1 + b^T A^+ a)^2}{a^T Z(A^T)a [b^T Z(A)b]^2} Z(A)bb^T Z(A),$$

где $c = \frac{1 + b^T A^+ a}{a^T Z(A^T)a b^T Z(A)b}.$

2) Для вектора a линейно зависящего от столбцов матрицы A , а вектора b^T – линейно не зависящего от строк матрицы таким образом, что, – для упрощения представления результата, – $b \perp L_{A^T}$, т.е. при выполнении условий $a^T Z(A^T)a = 0, b^T Z(A)b = \|b\|^2$, справедливы соотношения:

$$Z(A + ab^T) = Z(A) + \frac{k_{A,a,b} k_{A,a,b}^T}{\|k_{A,a,b}\|^2} - \frac{bb^T}{\|b\|^2},$$

где: $k_{A,a,b} = A^+ a - \frac{b}{\|b\|^2},$

$$Z((A + ab^T)^T) = Z(A^T + ba^T),$$

$$R(A + ab^T) = \left(I_n - \frac{kk^T}{\|k\|^2} \right) R(A) \left(I_n - \frac{kk^T}{\|k\|^2} \right).$$

3) Для векторов a и b^T одновременно линейно зависимых от соответственно столбцов и строк матрицы A , при условии падения ранга возмущённой матрицы: $\text{rank}(A + ab^T) = \text{rank}A - 1$, т.е. при выполнении условий: $a^T Z(A^T)a = 0, b^T Z(A)b = 0, b^T A^+ a = -1$, справедливы следующие соотношения:

$$Z(A + ab^T) = Z(A) + \frac{A^+ aa^T (A^+)^T}{a^T R(A^T)a},$$

$$Z((A + ab^T)^T) = Z(A^T + ba^T) = Z(A) + \frac{(A^+)^T bb^T A^+}{b^T R(A)b},$$

$$R(A + ab^T) = A^+(a, b)A^{+T}(a, b),$$

где: $A^+(a, b) = A^+ \frac{A^+ aa^T R(A^T)}{a^T R(A^T)a} \frac{R(A)bb^T A^+}{b^T R(A)b} + cA^+ ab^T A^+, c = \frac{b^T R(A)A^+ a}{a^T R(A^T)a b^T R(A)b}.$

4) Для векторов a и b^T одновременно линейно зависимых от, соответственно, столбцов и строк матрицы A , но при условии неизменности ранга возмущённой матрицы по сравнению с рангом A , т.е. при выполнении условий

$$a^T Z(A^T)a = 0, b^T Z(A)b = 0, b^T A^+ a \neq -1,$$

справедливы следующие соотношения:

$$Z(A + ab^T) = Z(A), \quad Z((A + ab^T)^T) = Z(A^T + ba^T) = Z(A^T),$$

$$R(A + ab^T) = R(A) \frac{A^+ ab^T R(A)}{1 + b^T A^+ a} \frac{R(A)ba^T A^{+T}}{1 + b^T A^+ a} + \frac{b^T R(A)b}{1 + b^T A^+ a} A^+ aa^T A^{+T}.$$

Основные элементы кластеризации по гиперплоскостям – множества соответствия

Как уже упоминалось, построение «множеств соответствия» в виде гиперплоскостей предполагает конструктивное описание их смещений и соответствующих линейных подпространств.

Смещение гиперплоскостей.

Смещения предлагается определять как средние векторов, принадлежащих к каждой из частей разбиения. Можно также выбрать в качестве смещения один из элементов разбиения.

Подпространства гиперплоскостей. При наличии смещений подпространства гиперплоскостей определяются как подпространства, натянутые на центрированные смещением (преобразованные вычитанием определённого вектора) векторы каждой из частей разбиения. В дальнейшем будет предполагаться, что центрирование каждой части разбиения производится соответствующими средними $\bar{x}_k, k = 1, 2$.

Конструктивное описание подпространств, натянутых на каждую из центрированных совокупностей векторов, обеспечивается построением для каждой из гиперплоскости подходящей матрицы $A_k, k = 1, 2$ так, чтобы подпространство - множество значений $L_k, k = 1, 2$ каждой из них совпадало с подпространством соответствующей гиперплоскости, т.е. с линейной оболочкой каждой из

центрированных групп векторов. В соответствии с замечанием 1 в качестве таких матриц можно выбрать матрицы, столбцами которых являются центрированные векторы каждой из частей разбиения соответственно. В этом случае ортогональными проекторами $P_{L_k}, k = 1, 2$ для каждого из подпространств гиперплоскостей будут P -проекторы для транспонированных к соответствующим матрицам:

$$P_{L_k} = P(A_k^T), k = 1, 2.$$

Таким образом, гиперплоскости $\Gamma_k, k = 1, 2$ определяются парами $(\bar{x}_k, A_k), k = 1, 2$:

$$\Gamma_k = \Gamma(\bar{x}_k, A_k), k = 1, 2 \quad (11)$$

Основные элементы кластеризации по гиперплоскостям – расстояния соответствия

В качестве «расстояний соответствия» векторов до каждого «множеств соответствия» $\Gamma_k = \Gamma(\bar{x}_k, A_k), k = 1, 2$ предлагается рассматривать евклидово расстояние векторов до гиперплоскостей $\Gamma_k = \Gamma(\bar{x}_k, A_k), k = 1, 2$, каковыми эти «множества соответствия» являются. Средства псевдообращения позволяют конструктивно описать соответствующие расстояния. Такое конструктивное описание возможно и в том случае, когда задаётся размерность $s: s \leq \min(\text{rank} A_k, k = 1, 2)$ – подпространств гиперплоскостей. Формулы, определяющие соответствующие расстояния, являются предметом следующей леммы.

Лемма 1. Для $\Gamma_k = \Gamma(\bar{x}_k, A_k), k = 1, 2$ расстояния соответствия $\rho(x, \Gamma_k), k = 1, 2$ произвольного вектора $x \in R^m$ до каждой из двух гиперплоскостей $\Gamma_k, k = 1, 2$ определяются соотношением:

$$\rho(x, \Gamma_k) = (x - \bar{x}_k)^T Z(U_s^T(k))(x - \bar{x}_k), k = 1, 2, \quad (12)$$

$$\text{Где } U_s(k) = \begin{cases} A_k = \sum_{i=1}^r y_i(k) x_i^T(k) \lambda_i(k) & \text{разм. } s \text{ не задана} \\ \sum_{i=1}^s y_i(k) x_i^T(k) \lambda_i(k) & \text{разм. } s \text{ задана} \end{cases}, r = 1, 2.$$

Кластеризации по гиперплоскостям – основные шаги алгоритма

Алгоритм кластеризации по гиперплоскостям состоит в последовательном, рекуррентном уточнении «множеств соответствия», каковыми являются гиперплоскости. На каждом рекуррентном шаге происходит уточнение набора элементов, порождающих «множества соответствия», построение пар $(\bar{x}_k, A_k), k = 1, 2$ отвечающих уточнённому разбиению, после чего происходит новое «уточнение разбиения» отбором в каждую часть разбиения векторов исходного набора по минимуму расстояний до вновь построенных гиперплоскостей. В общем, алгоритм состоит в выполнении следующих шагов.

1. На первом шаге производится разбиение на две совокупности произвольным образом.
2. На втором шаге для каждой из частей разбиения вычисляются:
 - смещения $\bar{x}_k, k = 1, 2$, как средние по векторам каждой из частей разбиения;

- матрицы $A_k, k = 1, 2$, как матрицы, построенные из центрированных соответствующими средними векторов каждой из групп как из столбцов.
3. На третьем шаге происходит «уточнение» разбиения: вычисляются «расстояния соответствия» каждого из векторов $x(1), \dots, x(n)$ до каждого из двух построенных «множеств соответствия»: до каждой из двух гиперплоскостей, – и происходит отнесение каждого из векторов $x(1), \dots, x(n)$ к той части разбиения, к которой он оказался ближе по «расстоянию соответствия» (12). В результате происходит формирование нового, «уточнённого» разбиения векторов $x(1), \dots, x(n)$ на две части.
 4. На четвёртом шагу происходит возвращение ко второму шагу алгоритма.

Кластеризация по гиперплоскостям – модификация расстояний

Расстояния до гиперплоскостей в лемме 1 определяются значениями квадратичных форм с матрицами

$$\sum_{i=1}^s y_i(k) x_i^T(k), k = 1, 2 \quad ,$$

Их можно рассматривать как взвешенное среднее матриц $y_i(k) x_i^T(k), i = \overline{1, r}, k = 1, 2$ с весами

$$\omega_i = \begin{cases} 1, i \leq s \\ 0, i = \overline{s+1, r} \end{cases}, \text{ соответственно, в нормированном варианте } \omega_i = \begin{cases} 1/s, i \leq s \\ 0, i = \overline{s+1, r} \end{cases}.$$

Рассмотрение взвешенных вариантов сумм из $y_i(k) x_i^T(k), i = \overline{1, r}, k = 1, 2$ с нормированными весами $\lambda_i^2(k), i = \overline{1, r}, k = 1, 2$ даёт следующий вариант расстояний ρ_R до «множеств соответствия». Они для этого случая определяются соотношением:

$$\rho_R(x, \Gamma_k) = \frac{1}{\text{tr}R(A_k^T(k)A_k)} (x - \bar{x}_k)^T R(A_k^T(k)) (x - \bar{x}_k), k = 1, 2. \quad (13)$$

Использование в качестве «расстояний соответствия» расстояний, определяемых соотношением (13) приводит к очевидному изменению алгоритма кластеризации: в нём «уточнение» разбиения третьего шага происходит на основе «расстояний соответствия», определяемых соотношениями (13) вместо – (12).

Рекуррентные формулы для алгебраического Jack Knife'a

При проверке элементов совокупностей на соответствие вычислением расстояний по формулам (12) или (13) тестируемые элементы принимают участие в формировании гиперплоскостей, представляющих кластеры. Резонной является также построение такой процедура проверки соответствия, при которой тестируемый элемент кластера, исключается из числа объектов, которые его определяют. В статистике такая процедура исключения носит название «Jack Knife» (складной нож) [Эфрон, 1988]. Поэтому процедуру тестирования на принадлежность кластеру с исключением тестируемых элементов из описания кластера будем называть алгебраическим Jack Knife'ом.

Заметим, что естественным является вариант кластеризации, когда исключение элемента приводит к падению ранга матрицы $A(k), k = 1, 2$ (п.3 теоремы 5)). Псевдообращение даёт конструктивную явную формулу проверки соответствующего условия.

Исключение тестируемых элементов из кластера изменяет как сдвиг (центр кластера), так и линейное подпространство кластера. Формулы (12),(13) при таком исключении, очевидным образом, переписываются в виде, для изменённых смещений (будем считать их средними) и изменённых матриц: $x_k^{(0)}, A^{(0)}(k), k = 1, 2$ соответственно.

Лемма 1 даёт возможность эффективной организации процедуры «отсеивания», в которой критерий замены строится на основе леммы 1 и имеет вид, определяемый следующей теоремой.

Теорема 6. В условиях падения ранга (п.3 теоремы 5) расстояния до гиперплоскостей, после исключения элемента из числа порождающих элементов, определяется следующим соотношением для одного из значений $k=1$ или $k=2$

$$\rho(x_j(k), \Gamma_j^{(0)}(k)) = \frac{n_k^2}{\left\| \left(E_m \quad \frac{q_j(k)q_j^T(k)}{\|q_j(k)\|^2} \right) \sum_{l \neq j} q_l(k) \right\|^2}, j = \overline{1, n_k}, k = 1, 2,$$

Где $x_j(k), \Gamma_j^{(0)}(k) j = \overline{1, n_k}, k = 1, 2$ – исключаемые элементы каждой из совокупностей и гиперплоскости, отвечающие «усечённым» совокупностям, а $q_j(k), j = \overline{1, n_k}, k = 1, 2$ столбцы с номером $j, j = \overline{1, n_k}$ в каждой из матриц $A_k^+, k = 1, 2$.

Заключение

В работе рассмотрены задачи кластеризации на основе концепции «множеств» и «расстояний соответствия», предложены варианты алгоритмов кластеризации, когда «множествами соответствия» являются гиперплоскости, а «расстояния соответствия» построены на основе вариантов расстояний до них. Применение аппарата псевдообращения позволяет описать все элементы соответствующих построений явными формулами, включая варианты алгебраического Jack Knife'a

Литература

- [Алберт, 1977] Алберт А. Регрессия, псевдоинверсия, рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1977.–305 с.
- [Donchenko, 2003] Donchenko V.S. Hough Transform and Uncertainty//Proceedings International Conference "Knowledge Dialog – Solution". – V. – June 16-23, 2003.–Varna (Bulgaria). – P.391-395.
- [Найкин,1999] Neural networks. A comprehensive Foundation. – New Jersey. – 1999.– 842 p.
- [Кириченко, 1997] Кириченко Н.Ф. Аналитическое представление псевдообратных матриц//Киб. и СА. - №2, 1997– С.98-122.
- [Кириченко, Донченко, 2007, а)] Кириченко Н.Ф., Донченко. В.С. Псевдообращение в задачах кластеризации.// Киб. и СА. - №4, 2007.– С.98-122.
- [Кириченко, Донченко, 2007, b)] Кириченко Н., Донченко В. Алгебраический Jack Knife: кластеризация по гиперплоскостям// Proceedings: XIII-th International Conference "Knowledge –Dialog – Solution".–June 18-24, 2007, Varna (Bulgaria). – 2007. – V.1.– P.89-95.
- [Кириченко, Лепеха, 2002] Кириченко Н.Ф., Лепеха Н.П. Псевдообратные и проекционные матрицы в применении к исследованию задач управления, наблюдения и идентификации// Киб. и СА.- №4, 2002. – С.107-123.
- [Kohonen, 2001] Kohonen T., Self-Organizing Maps.– Third Extended Edition.– New York, 2001.– 501 p.

- [Кириченко, Донченко, 2005] Кириченко М.Ф, Донченко В.С. Задача термінального спостереження динамічних системи: множинність розв'язків та оптимізація //Ж. Обч. та пр. мат. – Вип..3 , 2005.– С. 63-78.
- [Moore, 1920] Moore E.H. On the reciprocal of the general algebraic matrix//Bull. Amer. Math. Soc. – 26, 1920. – P. 394-395.
- [Pearson, 1901] Pearson K., On lines and planes of closest fit to systems of points in space//Philosophical Magazine.–1901, N 2.– P. 559—572.
- [Penrose, 1955] Penrose R. A generalized inverse for matrices// Proc. Camb. Philosophical Soc.- 51, 1955.– P. 406-413.
- [Sylvester, 1889] Sylvester J.J. On the reduction of a bilinear quantic of the nth order to the form of a sum of n products by a double orthogonal substitution, Messenger of Mathematics, – 1889.– N19.– P., 42—46;
- [Vapnik, 1998] Vapnik V.N. Statistical Learning Theory.–New York: Wiley. – 1998.
- [Эфрон, 1988] Эфрон Б. Нетрадиционные методы многомерного статистического анализа. – М.: Фин. и стат. – 1988.– 263 с.
-

Информация об авторах

Кириченко Николай Ф.– Профессор, Институт кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины, ведущий научный сотрудник

Донченко Владимир С. – Профессор, Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, факультет кибернетики, Украина, e-mail: voldon@unicyb.kiev.ua