

补缀式浓缩近邻分类器 BDPATCH

王 庆 人

(南开大学)

摘要

本文提出一种浓缩近邻分类器 BDPATCH。其浓缩集从编辑过的训练集经显露和补缀边界模式产生，具有 Bayes 渐近最优性。对 BDPATCH 和其它已有的 CNN 算法进行了比较，结果表明这种新的分类器具有高识别率，同时又是快速的。

一、导言

文献[1, 2]已经证明， k -近邻 (k -NN) 分类方法在 $n \rightarrow \infty$, $k \rightarrow \infty$ 和 $k/n \rightarrow 0$ 时是渐近 Bayes 最优的， n 为训练样本容量。但在 n 和 k 很大时占用内存和消耗机时很多；在分布函数复杂时， k 的最佳值也难以估计。浓缩近邻 (CNN) 分类方法^[3]在时间、空间上的效率都有较大提高。这种方法从训练样本中抽取一个浓缩子集，使得：1) 全部训练模式可以被浓缩子集和 1-近邻法正确分类；2) 浓缩集越小越好。文献 [4—7] 对于 CNN 法提出的各种改进都以浓缩集的最小化为目标。事实上仅仅给训练模式正确分类并不保证高识别率。目前尚无关于 CNN 法识别率的分析研究或渐近最优性的报道。

编辑近邻法 (ENN)^[8] 是 k -NN 的另一种改进：对训练样本施行编辑后，属于不同类别的模式不再交叉分布。ENN 的识别率已被证明是依概率渐近 Bayes 最优的^[9]。

本文提出一种高性能的浓缩近邻分类器 BDPATCH，它包括编辑、显露和补缀三个阶段。该法同时考虑了识别率和效率两方面的问题。

二、BDPATCH 浓缩过程及渐近最优性

1. Voronoi 多面体

设给定的识别问题有 m 个类别，每个模式表示为距离空间 D 的一个向量， S_n 为容量是 n 的训练样本

$$S_n = \{(X_i, \Theta_i) | X_i \in D, \Theta_i \in \{1, 2, \dots, m\}, i = 1, 2, \dots, n\}. \quad (1)$$

其中 Θ_i 是模式 (X_i, Θ_i) 的类别。对 S_n 施行编辑后得到 $S_n^E \subset S_n$ 。在 S_n^E 中可以按文献 [10] 的方法对每一个模式 (Y, Θ) 定义一个 Voronoi 多面体

$$V(Y, \Theta) = \{X \in D \mid \forall (Y', \Theta') \in S_n^E, |X, Y| \leq |X, Y'| \}. \quad (2)$$

其中 $|X, Y|$ 表示 X 与 Y 之间的距离; $V(Y, \Theta)$ 实际上由与 Y 最近的那些点组成。图 1 表示了各个 Voronoi 多面体, 它们共同构成 S_n^E 的 Voronoi 图。ENN 的 m 个分类区域实际上由各类模式的 Voronoi 多面体并成, 即

$$V_i^n = \bigcup_{\Theta=i} V(Y, \Theta), \\ i = 1, 2, \dots, m. \quad (3)$$

因此 ENN 的识别率可以表示为

$$R_n^E = \sum_{i=1}^m \pi_i P_i(V_i^n). \quad (4)$$

其中 π_i 为第 i 类模式的先验概率; P_i 为其概率测度。根据文献[9], 当合理地控制编辑过程时, 例如象轮番编辑 (MULTIEDIT) 或半保留法 (Holdout) 那样, R_n^E 依概率趋近于 Bayes 识别率 R^* .

2. 边界显露过程

如果一个 Voronoi 多面体与某个 V_i^n 有公共面, 我们就称它的相应模式为边界模式。设 EBD 为 S_n^E 中全体边界模式构成的集合。可以证明, 如果以 EBD 为浓缩集, 则 CNN 的识别率也为 R_n^E 。下面定义子集合 B_i , $i = 1, 2, \dots, m$.

$$B_i = \bigcup_{(X,i) \in S_n^E} \{(Y, \Theta) \in S_n^E, \Theta \neq i | \\ \forall (Y', \Theta') \in S_n^E, \Theta' \neq i \rightarrow |X, Y| \leq |X, Y'| \} \quad (5)$$

很容易证明

$$B_i \subset EBD, i = 1, 2, \dots, m. \quad (6)$$

B_i 实际由非 i 类模式组成, 并且每个这样的模式都是全体非 i 类模式中距离某个 i 类模式最近的。再定义

$$BD = \bigcup_{i=1}^m B_i. \quad (7)$$

一般地 $BD \neq EBD$, 但包含了 EBD 中相当数量甚至大部分模式, 并且容易根据定义 (5), (7) 求取。这就是下面的显露程序过程 EXPOSING。

Procedure EXPOSING;

For $i \leftarrow 1$ to m do

Begin

1) For each $(X, i) \in S_n^E$ do

find $(Y, \Theta) \in S_n^E$ Such that $\Theta \neq i$ and

$|X, Y| \leq |X, Y'|$ for $(Y', \Theta') \in S_n^E, \Theta' \neq i$

2) Collect (Y, Θ) found at step 1 to form B_i

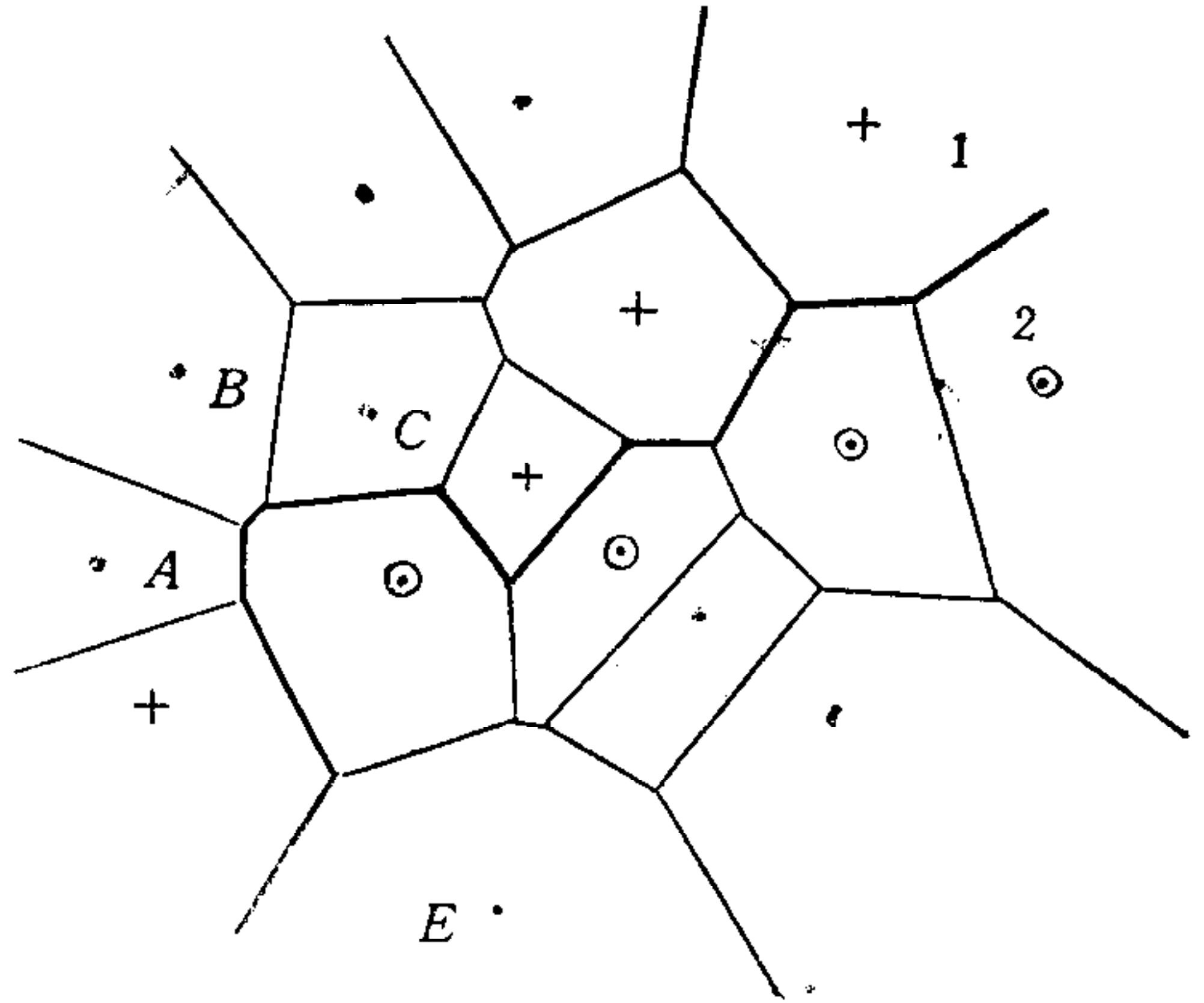


图 1 S_n^E 的 Voronoi 图
 $EBD = BDU\{A, B, C, E\}$

End;

$$\text{BD} = \bigcup_{i=1}^m B_i$$

End EXPOSING;

从图 1 可以看出, BD 包括了 EBD 的大多数模式, 但不是全部的, 因而若以 BD 为浓缩集, CNN 的识别率与 R_n^k 差别还比较大. 例如图 1 中的 BD 就不包括 EBD 中的 A, B, C 和 E 点.

3. 边界补缀过程

我们可以对 BD “补缀”, 使之扩大到十分接近 EBD. 补缀过程从 B_i 的任一模式开始, 见图 2. 设 X 是位于边界的一个 i 类模式, 离它最近的非 i 类模式 $Y_1 \in B_i$. 补缀从 Y_1 开始. 先把它放入 PATCH 集合. 过 Y_1 做平行于 X 与 Y_1 之间界面的平面, 凡在此平面的远离 X 一侧的模式都几乎不可能属于 EBD, 因而暂排除考虑. 例如 Y_4 被排除考虑. 在其余的非 i 类模式中, Y_2 距 X 最近, 因而它必属于 EBD, 被补入 PATCH. 同理过 Y_2 做平行于边界的平面后, Y_5 被排除考虑; Y_3 被补入 PATCH 后, Y_6 又被排除. 这个过程迭代地进行, 直到每个 B_i 都不再扩大为止. 下面是用类 Pascal 语句描述的补缀 (PATCHING) 程序过程. 这里假定 B_i 包含 n_i 个模式, ST_i, i, j, k 和 l 为局部整数变量, X, Y, Z 和 W 为局部向量变量, PATCH 为局部向量集合变量.

图 2 在 X 点处的 PATCHING

Procedure PATCHING

$ST_i \leftarrow 1$ for $i = 1, 2, \dots, m$

Repeat

for $i \leftarrow 1$ to m do

Begin

for $j \leftarrow ST_i$ to n_i do

Begin

$X \leftarrow$ the j th pattern in B_i ;

$(Y, \Theta) \leftarrow$ the closest pattern to X in $S_n^E - T_n^i$

where $T_n^i = \{(W, \Theta) \in S_n^E | \Theta = i\}$;

$\text{PATCH} \leftarrow \{(Y, \Theta)\}$;

every pattern in $S_n^E - T_n^i$ is made effective;

$k \leftarrow 1$;

Repeat

let (Y, Θ) be the k th pattern in PATCH;

$Z \leftarrow (Y - X) / |Y - X|$;

for each $W \in S_n^E - T_n^i$ do

if $Z \cdot (W - X) \geq 0$

then make W ineffective;

find the closest effective pattern in $S_n^E - T_n^i$;

if it ever exists, let it be assigned to (Y, Θ)

```

PATCH←PATCH + {(Y, Θ)}
k←k + 1
Until PATCH remains unchanged;
for k←1 to m, k<>i do
  Bk←Bk + PATCH ∩ Tik;
  increment nk
End
End

Until every Bi (i = 1, 2, ..., m) remains unchanged
End PATCHING;

```

4. 渐近最优性

图 3 解释了 BD 经补缀后, 加进了模式 A, C 和 E, 但还比 EBD 少一个模式 B, 从 A 开始或从 C 开始补缀时 B 被排除了。因为 B 位于过 A 的和过 C 的那种平行于界面的平面之外(图 2)。总之, 从邻近 B 的每一个模式看去, B 都是远离边界的。因此 B 的被排除, 在 ENN 法与用 BD 为浓缩集的 CNN 法间差别不大。其差别在图 3 中只局限于标为 Δ 的很小区域。如果记 CNN 的识别率为 R_n^C , 则

$$|R_n^C - R_n^E| \leq P(\Delta). \quad (8)$$

而 $P(\Delta)$ 是微乎其微的。既然已知 R_n^E 依概率趋近 R^* , 依式 (6), (8) 可以期望 R_n^C 依概率趋近 R^* 。因此可以得到直观的结论: Editing—EXPOSING—PATCHING 产生的浓缩集提供了渐近 Bayes 最优的 CNN 法。

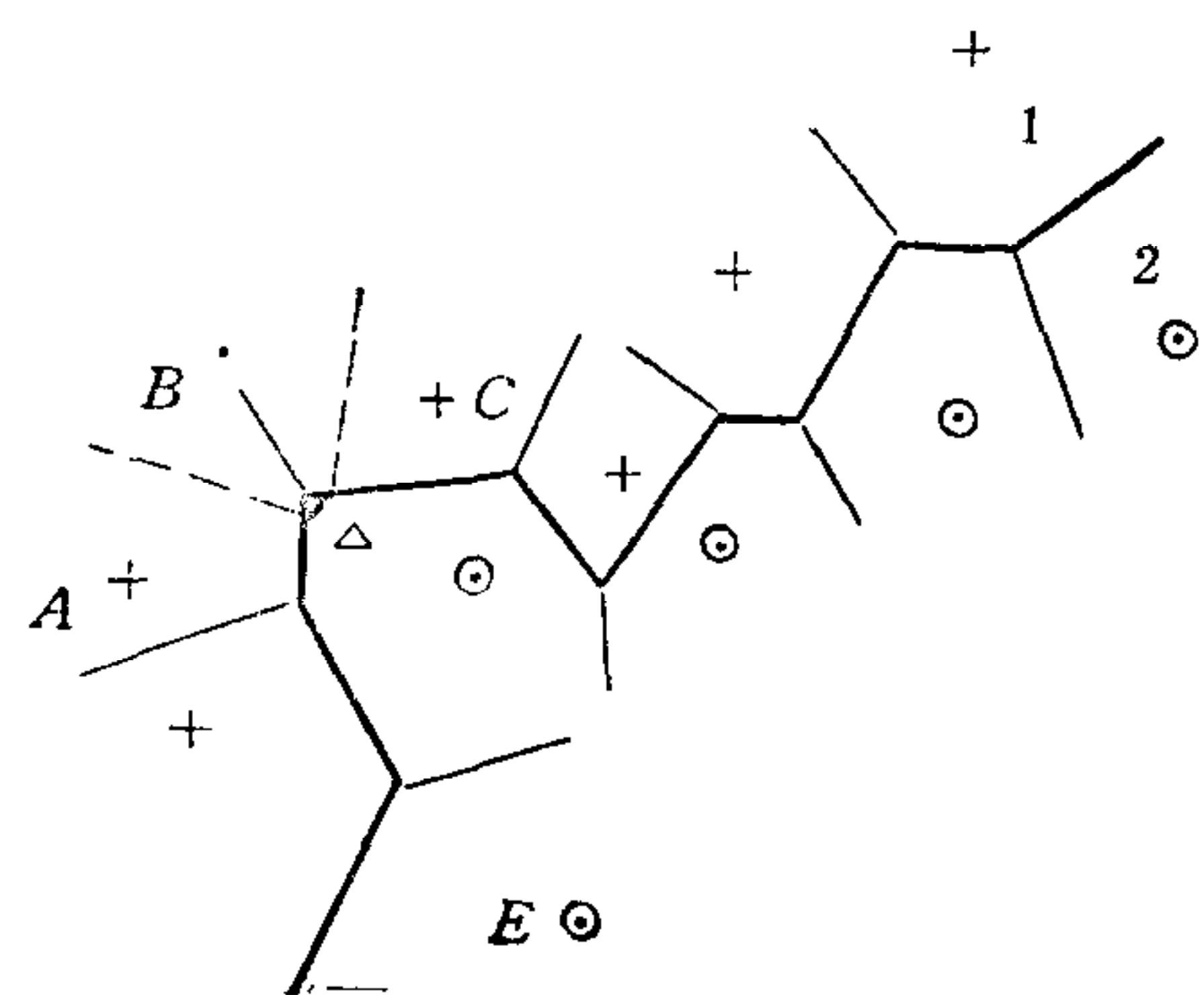


图 3 经 PATCHING 后的 BD EBD = BD ∪ {B}

三、仿真实验和结论

我们在 Fujitsu M-340S 计算机上对 BDPATCH 和其它六种 CNN 法进行了仿真实验。训练样本与检验样本独立地按上述两类问题的分布密度生成, 先验概率 $\pi_1 = \pi_2 = 1/2$:

$$f_1(x, y, z) = \frac{1}{2 \cdot (1.15 \sqrt{2\pi})^3} \exp \left[-\frac{(x-2)^2 + y^2 + (z-1)^2}{2 \cdot 1.15^2} \right] \\ + \frac{1}{2 \cdot (1.05 \sqrt{2\pi})^3} \exp \left[-\frac{(x+2)^2 + y^2 + (z-1)^2}{2 \cdot 1.05^2} \right], \quad (9)$$

$$f_2(x, y, z) = \frac{1}{2 \cdot (0.75 \sqrt{2\pi})^3} \exp \left[-\frac{x^2 + (y-2)^2 + (z+1)^2}{2 \cdot 0.75^2} \right] \\ + \frac{1}{2 \cdot (0.65 \sqrt{2\pi})^3} \exp \left[-\frac{x^2 + (y+2)^2 + (z+1)^2}{2 \cdot 0.65^2} \right]. \quad (10)$$

这个识别问题的分类边界是复杂的. 其 Bayes 识别率用 Monte-Carlo 法估计为 0.95295, 或误识率为 0.04750.

被仿真的近邻分类器包括

- 1) HART-68: 最原始的 CNN^[3].
- 2) EBHART: 连续施用 MULTIEDIT^[9], EXPOSING 和 HART-68.
- 3) REDUCE: 施用 HART-68 后再约简浓缩集^[4].
- 4) EBREDU: 连续施用 MULTIEDIT, EXPOSING 和 REDUCE.
- 5) SELTV: 是文献[5]所提出的 SELECTIVE 的一个简化, 即将其最后一步的动态规划改为启发式搜索.
- 6) EBSELT: 连续施用 MULTIEDIT, EXPOSING 和 SELTV.
- 7) BDPATCH: 本文所提浓缩算法, 即连续施用 MULTIEDIT, EXPOSING 和 PATCHING.

试验共使用了 15 个训练集, 其中每三个容量相同的为一组. 这五个容量值分别为 $n = 48, 96, 192, 400$ 和 800. 对每一容量值下每一 CNN 法进行三次仿真. 用独立生成的容量为 1200 的检验样本估计每一情况下的识别率、分类速度、内存占用和设计机时. 仿真结果列于表 1. 为了便于比较, 把编辑近邻法 MULTIEDIT 的性能列于标为 MTE-DIT 的一列中.

表 1 CNN 分类器平均性能

项 目	n	HART-68	EBHART	REDUCE	EB-REDU	SELTIV	EB-SELT	BDPATCH	MTE-DIT
训练机时 (秒)	48	0.13	0.65	0.79	0.92	0.55	0.38	0.74	0.68
	192	1.51	5.89	18.68	14.11	9.57	8.21	6.90	4.70
	800	23.22	74.58	---	293.61	202.71	173.08	82.55	32.30
内存开销	48	15.33	11.00	12.00	6.00	12.67	5.67	19.00	42.33
	192	34.67	32.00	28.33	12.67	29.00	13.00	58.33	168.33
	800	115.00	60.67	---	34.00	88.33	31.67	118.00	726.33
分类机时 (毫秒)	48	1.33	0.96	1.05	0.54	1.11	0.52	1.64	3.68
	192	2.97	2.69	2.43	1.08	2.49	1.13	4.87	15.48
	800	9.82	5.06	---	2.86	7.54	2.72	10.04	62.99
误 识 率	48	0.1167	0.1175	0.1278	0.1067	0.1261	0.0972	0.0891	0.0856
	192	0.0847	0.0744	0.0939	0.0775	0.1019	0.0636	0.0567	0.0564
	800	0.0786	0.0622	---	0.0617	0.0903	0.0644	0.0522	0.0517

观察和分析试验结果, 得到如下结论:

(1) 如文献[4,5]所期望的, REDUCE 和 SELTV 比 HART-68 的浓缩率要高, 因此分类效率也高. 但识别率有所下降. 原版 SELECTIVE^[5] 的识别率高于 SELTV, 但未考虑实际识别过程的误识率. 按照 SELTV 与 HART-68 的关系类推, SELECTIVE 的识别率可能更低. 上述比较同样适用于 EBHART, EBREDU 和 EBSELT 之间. 根据表 1 的数字, 增大浓缩率得到的效率增益并不明显, 但识别率的下降是明显的. 因此在研究和比较 CNN 方法时, 必须考虑实际识别过程的识别率. 本文是同类研究中第一次这样做的.

(2) 如同文献[9]和本文所期望的, 先编辑再浓缩比单纯浓缩效果要好得多. 本文的

前处理除包括编辑外,还用 EXPOSING 求取 BD 集。BD 中的模式全部是边界模式,从它出发的补缀是可靠的。

(3) MULTIEDIT 表现出渐近 Bayes 最优性。我们新发展的 BDPATCH 具有高的识别率。两种分类器的识别率几乎没有什差别,因此 BDPATCH 也表现出渐近最优性。但 BDPATCH 的时间、空间效率高得多。例如当 $n = 800$ 时, BDPATCH 快 6 倍,而且倍数是随着 n 的增大而上升的。

(4) BDPATCH 的分类速度比其它 CNN 法低些,但识别率明显高。而且是几种 CNN 算法中,唯一表现出象 MULTIEDIT 那样的渐近最优性的。此外 BDPATCH 所用的训练机时少于或等于其它 CNN 法。

参 考 文 献

- [1] Cover, T. M. and Hart, P. E., Nearest Neighbor Pattern Classification, *IEEE Trans. Inform. Theory*, IT-13(1967), 21—27.
- [2] Devroye, L., Some Property of the K-nearest Neighbor Rule, Proc. 5th Int. Conf. Pattern Recognition (1980), 103—105.
- [3] Hart, P. E., The Condensed Nearest Neighbor Rule, *IEEE Trans. Inform. Theory*, IT-14(1968), 515—516.
- [4] Gates, G. W., The Reduced Nearest Neighbor Rule, *IEEE Trans. Inform. Theory*, IT-18(1972), 431—433.
- [5] Ritter, G. L., Woodruff, H. B., Lowry, S. R. and Isenbour, T. L., An Algorithm for a Selective Nearest Neighbor Decision Rule, *IEEE Trans. Inform. Theory*, IT-21(1975), 665—669.
- [6] Tomek, I., Two Modifications of CNN, *IEEE Trans. Syst., Man, Cybern.*, SMC-6(1976), 769—772.
- [7] Gowda, K. C., and Krishna G., The Condensed Nearest Neighbor Rule Using the Concept of Mutual Nearest Neighborhood, *IEEE Trans. Inform. Theory*, IT-25(1979), 488—490.
- [8] Wilson, D. L., Asymptotic Property of NN-rules Using Edited Data, *IEEE Trans. Syst., Man. Cybern.*, SMC-2(1972), 408—421.
- [9] Devijver, P. A. and Kittler, J., Pattern Recognition, A Statistical Approach, Prentice-Hall Int., Inc. (1982).
- [10] Toussaint, G. T., Pattern Recognition and Geometrical Complexity, Proc. 5th Int. Conf. Pattern Recognition (1980), 1324—1327.

A CNN CLASSIFICATION DESIGN WITH BOUNDARY PATCHING

WANG QINGREN

(Nankai University)

ABSTRACT

A condensed nearest neighbor classification rule, BDPATCH, is proposed. The condensed set is produced by exposing and patching the boundary pattern subset of the edited training set. This procedure results in a Bayes asymptotically optimal classifier. Simulation experiment on this new and other existing CNN rules is presented, which shows that BDPATCH can achieve a high recognition rate and maintain a fast speed.