A. V. Goncharov

Выравнивание декартовых произведений упорядоченных множеств.

Работа посвящена исследованию метрических методов анализа объектов сложной структуры. Предлагается обощить метод динамического выравнивания для случая более сложных объектов. Эти объекты определены на двух и более осях времени. В дискретном случае такие объекты представимы в виде матриц. Метод динамического выравнивания временных рядов обобщается как метод динамического выравнивания матриц. Предложена функция расстояния, устойчивая к нелинейным деформациям декартового произведения двух и более временных шкал. Определен выравнивающий путь между объектами. В дальнейшем объектом называется матрица, в которой строки и столбцы соответствуют осям времени. Исследованы свойства предложенной функции расстояния. Для иллюстрации метода решаются задачи метрической классификации объектов на модельных данных и данных из датасета MNIST.

Key words: функция расстояния; динамическое выранивание; расстояние между матрицами; нелинейные деформации времени; пространственно временные ряды.

1 Введение

Временные ряды представляют собой набор измерений, упорядоченных по оси времени. Анализ временных рядов производится при решении задач, связанных с классификацией активности человека по измерениям акселерометра телефона, поиском характерного паттерна в EEG сигналах, кластеризации набора ECoG данных и во многих других задачах. Рассматриваются объекты, для которых время между измерениями фиксировано, но условия их измерений могут варьироваться. В данной работе для построения адекватной функции расстояния между объектами требуетсяс учесть нелинейные деформации относительно оси времени: глобальные и локальные сдвиги, растяжения и сжатия (ссылка).

Решение задач анализа временных рядов: классификации, детектирования паттернов, кластеризации и других, проводится различными методами (ссылка). Первая группа методов (ссылка) основана на анализе параметров моделей, с помощью которых строится описание временных рядов. Вторая группа (ссылка) основана на анализе их признакового описания (ссылка). Третья группа основана на анализе формы (ссылка). Комбинации этих подходов описаны в (ссылка).

Метрические методы находят схожие объекты внутри набора данных. ИСпользуются функции расстояния над временными рядами: расстояние Хаусдорфа (ссылка), MODH (ссылка), расстояние, основанное на HMM (ссылка), Евклидово расстояние в исходном пространстве или в пространтсве сниженной размерности (ссылка), LCSS и др. Показано (ссылка), что в случае локальных или глобальных деформаций времени при решении задач, требующих анализа исходной формы временного ряда метод динамического выравнивания оси времени DTW превосходит (ссылка) другие функции расстояния по качеству итогового решения задачи, так как при наличие смещений двух объектов друг относительно друга требуется выравнивать их оптимальным образом, для вычисления расстояния между ними.

В этой работе предлагается перейти от рассмотрения объекта вида $\mathbf{s}(t)$, задающего временные ряды, к более общему случаю $\mathbf{s}(\mathbf{t})$. Возможно теоретическое обобщение предлагаемых методов на случай конечного множества осей времени, но из-за существенного роста вычислительной сложности, предлагается рассмотреть объекты, определенные на двух осях времени $\mathbf{s}(t_1, t_2)$. В случае дискретной и ограниченной сверху шкалы времени временной ряд представляет собой вектор фиксированной размерности. По аналогии с этим объект настоящего исследования представлен матрицей.

Вводятся ограничения на зависимости осей времени в декартовом произведении для таких объектов. Определена гипотеза порождения данных: объекты одного класса эквивалентности получены при помощи допустимых преобразований, а именно локальных деформаций: возможно растяжение и сжатие каждой из осей времени по отдельности. Такое преобразование представляется дуплицированием строк и столбцов матриц. В число допустимых преобразований попадают и глобальные деформации: сдвиги объектов. Они представляются добавлением и удалением крайних строк и столбцов исходных матриц. Для каждой из осей времени должны выполняться свойства времени: монотонность и непрерывность. Похожими свойствами обладает, например, частотный спектр сигнала, где одна ось определяет время, а другая — частоту, величину, обратную времени.

Между двумя объектами, матрицами, в случае допустимых преобразований требуется определить инвариантную к таким преобразованием осей времени функцию расстояния, которая сможет выделить классы эквивалентности множества преобразованных объектов. Работа посвящена определению такой функции расстояния как обобщения метода динамического выравнивания временных рядов DTW для матриц.

Целью данной работы является построение метода, основанного на динамическом выранивании осей времени для матриц. Метод динамического выравнивания временных рядов определен только для объектов с одной осью времени, что делает его неприменимым для описанного случая. Однако концепции, используемые на каждой стадии вычисления оптимального выравнивания, обощаются на такой случай. Работа исследует свойства предложенного метода и сравнивает результаты применения метода к задачам классификации изображений функцией расстояния L_2.

Для иллюстрации и анализа решается задача метрической классификации объектов (матриц низкой размерности). Используются два набора данных: модельные данные, которые согласуются с выдвинутой гипотезой порождения данных для временных рядов и подмножество датасета MNIST сниженной размерности.

2 Постановка заадчи

Рассмотрим задачу построения функции расстояния между объектами. Функция расстояния должна быть инвариантна к допустимым преобразованиям осей времени: глобальным и локальным линейным и нелинейным деформациям временной шкалы. Ниже приведены две постановки задачи, с помощью которых определены свойства предложенной функции расстояния, оценены ее качество и проведены сравнение нескольких функций расстояния: предложенной и L_2.

Первая постановка задачи проверяет общее свойство функций расстояния: "объединение" схожих объектов и "разделение" непохожих объектов. Вводится определение свойства инвариантности функции расстояния к допустимым преобразованиям осей времени. Вторая постановка задачи уточняет первую и заключается в проведении метрической классификации методом ближайшго соседа.

Постановка задачи выбора функции расстояния между двумя объектами:

На двух временных осях заданы объекты вида $\mathbf{A}(t_1, t_2) \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Функция $G_w(\mathbf{A}) : \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}^{\hat{n} \times \hat{n}}$ задает все допустимые преобразования исходного объекта $\mathbf{A}$: глобальные сдвиги, локальные линейные и нелинейные деформации. Параметр $w \in \mathbb{R}$ функции G фиксирует эти преобразования.

Определение: Допустимым элементарным преобразованием матрицы $\mathbf{A}$ примем: дуплицирование случайных строк и столбцов исходной матрицы, добавление или удаление крайних строк и столбцов.

Определение: Допустимым преобразованием матрицы $\mathbf{A}$ примем случайную последовательность допустимых элементарных преобразований матрицы $\mathbf{A}$ и обозначим как $G_w(\mathbf{A})$.

Объект $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}$ получен из объекта $\mathbf{A}$ при помощи допустимых трансформаций $G_{\hat{w}}$, если существует $\hat{w} : \mathbf{B} = G_{\hat{w}}(\mathbf{A})$.

Критерий качества функции расстояния между двумя объектами $\rho : \mathbb{R}^{\hat{n}_1 \times \hat{n}_2} \times \mathbb{R}^{\hat{n}_3 \times \hat{n}_4} \to \mathbb{R}^+$ оценим на выборке $\mathfrak{D} = \{\mathbf{A}_i\}_{i=1}^m$ объектов вида $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Заданы допустимые трансформации двух объектов $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathfrak{D}$, с параметрами w_1 и w_2, такие, что $G_{w_1}(\mathbf{A}) = G_{w_2}(\mathbf{B})$. Задано множество объектов $\{\mathbf{C}_i\}$, для которых не существует таких $w_i, w : G_w(\mathbf{A}) = G_{w_i}(\mathbf{C}_i)$.

В данной работе решается задача выбора функции расстояния ρ, значение которой между $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ меньше, чем между объектом $\mathbf{A}$ и любым объектом $\mathbf{C}_i$: $\forall i \quad \rho(\mathbf{A}, \mathbf{B}) < \rho(\mathbf{A}, \mathbf{C}_i)$.

Критерием качества для функции расстояния ρ на выборке $\mathfrak{D}$ примем долю объектов, для которых указанное неравенство выполняется:

$$S_\rho(\mathfrak{D}) = \frac{1}{m} \sum_i \prod_{\{\mathbf{B}_j\}_i} \prod_{\{\mathbf{C}_k\}_i} \big[\rho(\mathbf{A}_i, \mathbf{B}_j) < \rho(\mathbf{A}_i, \mathbf{C}_k)\big], \quad \text{где}$$

$\{\mathbf{B}_j\}_i = \{\mathbf{B} \in \mathfrak{D} | \exists w_1, w_2 : G_{w_1}(\mathbf{A}_i) = G_{w_2}(\mathbf{B})\}$, один класс эквивалентности с $\mathbf{A}_i$

$\{\mathbf{C}_k\}_i = \{\mathbf{C} \in \mathfrak{D} | \nexists w_1, w_2 : G_{w_1}(\mathbf{A}_i) = G_{w_2}(\mathbf{C})\}$, разные классы эквивалентности с $\mathbf{A}_i$

Постановка задачи выбора функции расстояния ρ сводится к задаче максимизации критерия качества:

$$\rho = \underset{\rho \in \{mDTW, L_2\}}{\operatorname{argmax}} S_\rho(\mathfrak{D}).$$

Прикладное использование функции расстояния:

Задана выборка $\mathfrak{D} = \{(\mathbf{A}_i, y_i)\}_{i=1}^m$, состоящая из пар объект — ответ. Объектами служат объекты сложной структуры: $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$, а ответами являются метки класса — $y_i \in Y = \{1, ..., E\}$, где $E \ll m$. Выборка разделена на обучение $\mathfrak{D}_l = \{(\mathbf{A}_i, y_i)\}_{i=1}^{m_1}$ и контроль $\mathfrak{D}_{m_1}^{m_1+m_2}$.

Пусть модель классификации f принадлежит множеству моделей метрической классификации 1NN, которые классифицируемому объекту ставят в соответствие метку класса ближайшего объекта из обучающей выборки по заданной функции расстояния ρ:

$$\hat{y} = f(\mathbf{B}|\rho) = y_{\underset{i=1,\dots,m_1}{\operatorname{argmin}} \rho(B, A_i)}$$

Функция ошибки S модели f для задачи классификации — доля ошибок на контрольной выборке:

$$S(f|\rho) = \frac{1}{m_2} \sum_{i=1}^{m_1} [f(\mathbf{A}_i|\rho) \neq y_i].$$

Требуется выбрать функцию расстояния ρ для модели классификации $f : \mathbb{R}^{n \times n} \to Y$, минимизирующую функцию ошибки S на контрольной выборке:

$$f = \underset{\rho}{\operatorname{argmin}}\big(S(f|\rho)\big). \tag{1}$$

3 MatrixDTW определение

В качестве оптимальной функции расстояния в случае допустимых трансформаций над объектами указанной структуры предлагается использовать функцию расстояния Dynamic Time Warping, модифицированную для случая выравнивания двойной шкалы времени. Ниже приведены необходимые определения и мотивация сравнения со случаем одной шкалы времени.

Определение 1: *Даны два объекта* $\boldsymbol{A}$ *и* $\boldsymbol{B}$ *указанной структуры. Будем считать, что* $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$. *Пусть* $\boldsymbol{\Omega}^{n\times n\times n\times n}$ *— это тензор, такой что его элемент* Ω_{ijkl} *равен квадрату разности между* (i,j)*-ым и* (k,l)*-ым элементами* $\boldsymbol{A}$ *и* $\boldsymbol{B}$*:*

$$\Omega_{ijkl} = (\mathbf{A}(i,j) - \mathbf{B}(k,l))^2.$$

Определение 2: *Путем* $\boldsymbol{\pi}$ *между двумя объектами указанной структуры* $\boldsymbol{A}$ *и* $\boldsymbol{B}$ *назовем множество пар индексов элементов тензора* $\boldsymbol{\Omega}$*:*

$$\boldsymbol{\pi} = \{\pi\} = \{((i,j),(k,l))\}, \quad r = 1,\dots,R, \quad i,j,k,l \in \{1,...,n\},$$

где R *— длина пути, зависящая от выбора пути. Он должен удовлетворять следующим условиям:*

Частичный порядок. *Для элементов пути* $\boldsymbol{\pi}$ *с фиксированными значениями* i,k*, если такие содержатся в этом пути, можно задать порядок:* $\{((i,j_r),(k,l_r))\}_{r=1}^{\tilde{R}}$*, где* $\tilde{R}$ *— число таких элементов.*

Граничные условия. *Пусть* $((i,j),(k,l) \in \boldsymbol{\pi}$*, тогда для этих* i,j,k,l *выполняется:* $((1,j),(1,l) \in \boldsymbol{\pi}$ *и* $((i,1),(k,1) \in \boldsymbol{\pi}$*. Также путь* $\boldsymbol{\pi}$ *содержит в противоположные углы тензора* $\boldsymbol{\Omega}$*:* $((1,1),(1,1)) \in \boldsymbol{\pi}$ *и* $((n,n),(n,n)) \in \boldsymbol{\pi}$*.*

Непрерывность по направлению. *Для упорядоченных элементов пути* $\boldsymbol{\pi}$ *с фиксированными значениями* i,k*:* $\{((i,j_r),(k,l_r))\}_{r=1}^{\tilde{R}}$*, выполняется условие непрерывности:* $((i,j_r),(k,l_r)) = (p_1,p_2)$ *и* $((i,j_{r-1}),(k,l_{r-1})) = (q_1,q_2), \quad r = 2,...,\tilde{R}$*, тогда*

$$p_1 - q_1 \leq 1, \quad p_2 - q_2 \leq 1.$$

Это ограничение нужно, чтобы в шаге пути $\boldsymbol{\pi}$ *по фиксированному направлению времени участвовали только соседние элементы матрицы (включая соседние по диагонали).*

Монотонность по направлению. *Для упорядоченных элементов пути* $\boldsymbol{\pi}$ *с фиксированными значениями* i, k: $\{((i, j_r), (k, l_r))\}_{r=1}^{\tilde{R}}$, *выполняется условие непрерывности:* $((i, j_r), (k, l_r)) = (p_1, p_2)$ *и* $((i, j_{r-1}), (k, l_{r-1})) = (q_1, q_2), \quad r = 2, ..., \tilde{R}$. *Тогда выполняется хотя бы одно из условий*

$$p_1 - q_1 \geq 1, \quad p_2 - q_2 \geq 1.$$

Это ограничение обусловлено природой рассматриваемых последовательностей и предназначено для монотонности функции выравнивания времени.

Определение 3. *Стоимостью* $Cost(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{\pi})$ *пути* $\boldsymbol{\pi}$ *между объектами* $\boldsymbol{A}$ *и* $\boldsymbol{B}$ *назовем*

$$Cost(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{\pi}) = \sum_{((i,j),(k,l)) \in \boldsymbol{\pi}} \Omega_{ijkl}. \tag{2}$$

Определение 4. *Путем наименьшей стоимости (выравнивающим путем)* $\hat{\boldsymbol{\pi}}$ *между объектами* $\boldsymbol{A}$ *и* $\boldsymbol{B}$ *назовем путь, имеющий наименьшую стоимость среди всех возможных путей между объектами* $\boldsymbol{A}$ *и* $\boldsymbol{B}$:

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \underset{\boldsymbol{\pi}}{argmin}\, Cost(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{\pi}). \tag{3}$$

Определение 5. *Функцию расстояния* $MatrixDTW(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ *между объектами* $\boldsymbol{A}$ *и* $\boldsymbol{B}$ *зададим как стоимость выравнивающего пути* $\hat{\boldsymbol{\pi}}$:

$$MatrixDTW(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}) = Cost(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \hat{\boldsymbol{\pi}}). \tag{4}$$

Мотивация метода

В случае выравнивания одной временной шкалы итоговая матрица в каждой ячейке i, j содержит расстояние между под-рядом временного ряда и под-рядом временного ряда.

Рассмотрим классический алгоритм динамического выравнивания двух временных рядов $\mathbf{s} \in R^n$ и $\mathbf{c} \in R^m$:

$D(1 : n + 1, 1 : m + 1) = inf;$

$D(1, 1) = 0;$

$for \quad i = 2 : n + 1$

$\qquad for \quad j = 2 : m + 1$

$\qquad\qquad cost = (\mathbf{s}(i - 1) - \mathbf{c}(j - 1))^2;$

$$D(i,j) = cost + min([D(i-1,j), D(i,j-1), D(i-1,j-1)]);$$

$$DTW(\mathbf{s},\mathbf{c}) = sqrt(D(n+1,m+1)).$$

Элемент $D(i,j)$ матрицы D соответствует стоимости выравнивающего пути между подпоследовательностями исходных временных рядов: $\mathbf{s}(1:i)$ и $\mathbf{c}(1:j)$. Алгоритм построения наилучшего выравнивания времени подразумевает, что оптимальное выравнивание таких двух подпоследоватльностей может быть получено тремя различными вариантами:

1. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{s}(1:i-1)$ и $\mathbf{c}(1:j)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов (i,j).

2. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{s}(1:i)$ и $\mathbf{c}(1:j-1)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов (i,j).

3. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{s}(1:i-1)$ и $\mathbf{c}(1:j-1)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов (i,j).

Предлагается перенести эти рассуждения на случай двух временных шкал и выранивания двух матриц $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$. Тогда элемент $((i,j),(k,l))$ четырехмерного тензора дожен соответствовать стоимости выравнивающего пути между $\mathbf{A}(1:i,1:j)$ и $\mathbf{B}(1:k,1:l)$. При этом предлагается получать такое оптимальное выравнивание семью различными способами:

1. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{A}(1:i-1,1:j)$ и $\mathbf{B}(1:k,1:l)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов $((i,j),(k,l))$, а также дублируются все пары индексов пути $\{((i-1,j),(k,l)) \in \boldsymbol{\pi} \quad | \quad j,l-$произвольные,$i,k-$фиксированные$\}$ с заменой $i-1$ на i.

2. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{A}(1:i,1:j-1)$ и $\mathbf{B}(1:k,1:l)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов $((i,j),(k,l))$, а также дублируются все пары индексов пути $\{((i,j-1),(k,l)) \in \boldsymbol{\pi} \quad | \quad i,k-$произвольные,$j,l-$фиксированные$\}$ с заменой $j-1$ на j.

3. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{A}(1:i, 1:j)$ и $\mathbf{B}(1:k-1, 1:l)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов $((i,j),(k,l))$, а также дублируются все пары индексов пути $\{((i,j),(k-1,l)) \in \boldsymbol{\pi} \quad | \quad j,l-$произвольные,$i,k-$фиксированные$\}$ с заменой $k-1$ на k.

4. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{A}(1:i, 1:j)$ и $\mathbf{B}(1:k, 1:l-1)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов $((i,j),(k,l))$, а также дублируются все пары индексов пути $\{((i,j),(k,l-1)) \in \boldsymbol{\pi} \quad | \quad i,k-$произвольные,$j,l-$фиксированные$\}$ с заменой $l-1$ на l.

5. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{A}(1:i-1, 1:j)$ и $\mathbf{B}(1:k-1, 1:l)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов $((i,j),(k,l))$, а также дублируются все пары индексов пути $\{((i-1,j),(k-1,l)) \in \boldsymbol{\pi} \quad | \quad j,l-$ произвольные,$i,k-$ фиксированные$\}$ с заменой $i-1$ на i, $k-1$ на k.

6. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{A}(1:i, 1:j-1)$ и $\mathbf{B}(1:k, 1:l-1)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов $((i,j),(k,l))$, а также дублируются все пары индексов пути $\{((i,j-1),(k,l-1)) \in \boldsymbol{\pi} \quad | \quad i,k-$ произвольные,$j,l-$ фиксированные$\}$ с заменой $j-1$ на j, $l-1$ на l.

7. Минимальная из перечисленных вариантов стоимость у выравнивающего пути между $\mathbf{A}(1:i-1, 1:j-1)$ и $\mathbf{B}(1:k-1, 1:l-1)$. Тогда к этому выравнивающему пути добавляется пара индексов $((i,j),(k,l))$, а также дублируются все пары индексов пути $\{((i,j-1),(k,l-1)) \in \boldsymbol{\pi} \quad | \quad i,k-$произвольные,$j,l-$фиксированные$\}$ с заменой $j-1$ на j, $l-1$ на l и все пары индексов пути $\{((i-1,j),(k-1,l)) \in \boldsymbol{\pi} \quad | \quad j,l-$произвольные,$i,k-$фиксированные$\}$ с заменой $i-1$ на i, $k-1$ на k.

С учетом указанных вариантов алгоритм вычисления расстояния между объектами примет вид:

$D(1:n+1, 1:n+1, 1:n+1, 1:n+1) = inf;$

$D(1,1,1,1) = 0;$

$\pi(1,1,1,1) = ((1,1),(1,1))$

$for \quad i,j,k,l \in \mathbb{N}^{2:n+1} \times \mathbb{N}^{2:n+1} \times \mathbb{N}^{2:n+1} \times \mathbb{N}^{2:n+1}$

$$\overline{i,j,k,l} = \mathrm{argmin}([D(i-1,j,k,l), D(i,j-1,k,l),$$

$D(i,j,k{-}1,l), D(i,j,k,l{-}1), D(i{-}1,j,k{-}1,l), D(i,j{-}1,k,l{-}1),$

$D(i-1,j-1,k-1,l-1)]);$

$if \quad \overline{i,j,k,l} == i-1,j,k,l:$

$cost = \sum_{r,f:((i-1,r),(k,f))\in\pi(i-1,j,k,l)} (\mathbf{A}(i,r)-\mathbf{B}(k,f))^2;$

$\pi(i,j,k,l) = \pi(i-1,j,k,l) \cup \{((i,r),(k,f))|((i-1,r),(k,f)) \in$

$\in \pi(i-1,j,k,l)\} \cup \{((i,j),(k,l))\}$

$D(i,j,k,l) = cost + D(\overline{i,j,k,l})$

$if \quad \overline{i,j,k,l} == i,j-1,k,l:$

$cost = \sum_{r,f:((r,j-1),(f,l))\in\pi(i,j-1,k,l)} (\mathbf{A}(r,j)-\mathbf{B}(f,l))^2;$

$\pi(i,j,k,l) = \pi(i,j-1,k,l) \cup \{((r,j),(f,l))|((r,j-1),(f,l)) \in$

$\in \pi(i,j-1,k,l)\} \cup \{((i,j),(k,l))\}$

$D(i,j,k,l) = cost + D(\overline{i,j,k,l})$

$if \quad \overline{i,j,k,l} == i,j,k-1,l:$

$cost = \sum_{r,f:((i,r),(k-1,f))\in\pi(i,j,k-1,l)} (\mathbf{A}(i,r)-\mathbf{B}(k,f))^2;$

$\pi(i,j,k,l) = \pi(i,j,k-1,l) \cup \{((i,r),(k,f))|((i,r),(k-1,f)) \in$

$\in \pi(i,j,k-1,l)\} \cup \{((i,j),(k,l))\}$

$D(i,j,k,l) = cost + D(\overline{i,j,k,l})$

$if \quad \overline{i,j,k,l} == i,j,k,l-1:$

$cost = \sum_{r,f:((r,j),(f,l-1))\in\pi(i,j,k,l-1)} (\mathbf{A}(r,j)-\mathbf{B}(f,l))^2;$

$\pi(i,j,k,l) = \pi(i,j,k,l-1) \cup \{((r,j),(f,l))|((r,j),(f,l-1)) \in$

$\in \pi(i,j,k,l-1)\} \cup \{((i,j),(k,l))\}$

$D(i,j,k,l) = cost + D(\overline{i,j,k,l})$

$if \quad \overline{i,j,k,l} == i-1,j,k-1,l:$

$cost = \sum_{r,f:((i-1,r),(k-1,f))\in\pi(i-1,j,k-1,l)} (\mathbf{A}(i,r)-\mathbf{B}(k,f))^2;$

$\pi(i,j,k,l) = \pi(i-1,j,k-1,l) \cup \{((i,r),(k,f))|$

$|((i-1,r),(k-1,f)) \in \pi(i-1,j,k-1,l)\} \cup \{((i,j),(k,l))\}$

$D(i,j,k,l) = cost + D(\overline{i,j,k,l})$

$if \quad \overline{i,j,k,l} == i,j-1,k,l-1:$

$cost = \sum_{r,f:((r,j-1),(f,l-1))\in\pi(i,j-1,k,l-1)} (\mathbf{A}(r,j)-\mathbf{B}(f,l))^2;$

$\pi(i,j,k,l) = \pi(i,j-1,k,l-1) \cup \{((r,j),(f,l))|$

$|((r,j-1),(f,l-1)) \in \pi(i,j-1,k,l-1)\} \cup \{((i,j),(k,l))\}$

$D(i,j,k,l) = cost + D(\overline{i,j,k,l})$

$if \quad \overline{i,j,k,l} == i-1,j-1,k-1,l-1:$

$cost = \sum_{r,f:((r,j-1),(f,l-1))\in\pi(i,j-1,k,l-1)} (\mathbf{A}(r,j)-\mathbf{B}(f,l))^2 +$

$+ \sum_{r,f:((i-1,r),(k-1,f))\in\pi(i-1,j,k-1,l)} (\mathbf{A}(i,r)-\mathbf{B}(k,f))^2;$

$$
\begin{aligned}
\pi(i,j,k,l) &= \pi(i,j-1,k,l-1) \cup \{((r,j),(f,l))| \\
&\quad |((r,j-1),(f,l-1)) \in \pi(i,j-1,k,l-1)\} \cup \{((i,r),(k,f))| \\
&\quad |((i-1,r),(k-1,f)) \in \pi(i-1,j,k-1,l)\} \cup \{((i,j),(k,l))\} \\
D(i,j,k,l) &= cost + D(\overline{i,j,k,l})
\end{aligned}
$$

$$MatrixDTW(\mathbf{A},\mathbf{B}) = sqrt(D(n+1,n+1,n+1,n+1))$$

Следует отмтетить, что алгоритм имеет высокую сложность вычисления — $O(n^4)$. Предполагается ускорение метода при помощи использование аналогичного Sakoe-Chiba band ограничения для случая двух осей времени. Такой подход позволит сократить вычислительную сложность алгоритма до $O(n^2k^2)$, где k — заранее заданное число.

4 Вычислительный эксперимент

Вычислительный эксперимент проводился как на модельных данных, порождение которых согласуется с гипотезой порождения данных, так и на реальных данных: коллекция MNIST, к которым применялись различного рода искажения, согласующиеся с гипотезой порождения данных. Эксперимент был проведен и на спектрограммах различных зашумленных сигналов.

В качестве модельных данных использовались матрицы, в которых ненулевыми были: горизонтальная и вертикальная линии, случайный прямоугольник. На модельные данные накладывался шум. К данным применялось случайное число преобразований времени: как строки, так и столбцы матрицы могли быть продублированы, тем самым создавая новый объект. Такие искажения согласуются с гипотезой о наличии локальных искажений. Также к матрицам могли быть конкатенированы разное число нулевых строк и столбцов, что согласуется с гипотезой о наличии глобальных искажений в данных.

Как было указано в постановеке задачи, решается задача метрической классификации методами ближайшего соседа. В таблице ниже приведены значения качества метрической классификации (ссылка) при использовании двух функций расстояния: предложенной в работе (ссылка) и L_2. Тестирование проведено на различного рода данных: исходных модельных данных без наложения допустимых преобразований, с ними, а также на модельных данных с наложенным поверх объектов случайным шумом.

Данные / Метод	L_2	MatrixDTW
Модельные данные без преобразований	92%	100%
Модельные данные с преобразованиями	86%	100%
Модельные данные с преобразованиями и шумом	69%	92%

Из таблицы видно, что значение функционала качества значительно выше при использовании предложенной функции расстояния. На Рисунке 1 демонстрируется оптимальное выравнивание двух объектов выборки друг относительно друга. Оптимальное выравнивание задано выравнивающим путем $\boldsymbol{\pi}$ между этими объектами. При помощи соединительных линий показаны элементы этого пути, которые ставят в соответствие друг другу элементы каждой из матриц.

Для проведения эксперимента на реальных данных была подготовлена подвыборка данных MNIST, состоязая из 100 объектов двух классов: 0 и 1. К объектам подвыборки были применены описанные выше допустимые преобразования. Решается задача метрической классификации методами ближайшего соседа. В таблице ниже приведены значения качества метрической классификации (ссылка) при использовании двух функций расстояния: предложенной в работе (ссылка) и L_2. Тестирование проведено на исходных данных MNIST без наложения допустимых преобразований и с ними.

Данные / Метод	L_2	MatrixDTW
MNIST без искажений	95%	95%
MNIST с искажениями	53%	92%

Аналогично случаю модельных данных, значение функционала качества выше при использовании предложенной функции расстояния. На Рисунке 2 показано оптимальное выравнивание объектов различных классов.

Тот же эксперимент был проведен для классификации спектров различных временных рядов. На рисунке 3 показаны примеры сигналов, для которых был составлен Фурье-спектр. Примеры спектров приведены на рисунке 4.

Спектр получен путем применения быстрого преобразования Фурье к исходному сигналу для различных окон с фиксированным размером и сдвигом. Исходные временные ряды обладали свойством периодичности, период выбирался случайным образом. В таблице ниже приведены значения качества метрической классификации (ссылка) при использовании двух функций расстояния: предложенной в работе (ссылка) и L_2.

Данные / Метод	L_2	MatrixDTW
Спектр сигнала	83%	96%

В каждом из проведенных экспериментов была продемонстрирована устойчивость предложенного подхода к допустимым преобразованиям, а также метод доставлял большее значение функционала качества.

5 Заключение

В работе предложено обощение классического метода динамического выравнивания временных рядов для случая объектов на двух осях времени. Вычислительный эксперимент позволил проанализировать свойства подхода. Указанные свойства были проверены и подтверждены на реальных и модельных данных. Качество решения задачи метрической классификации высокое, вычислительная сложность метода также высокая, что ограничивает применимость метода на объектах высокой размерности.

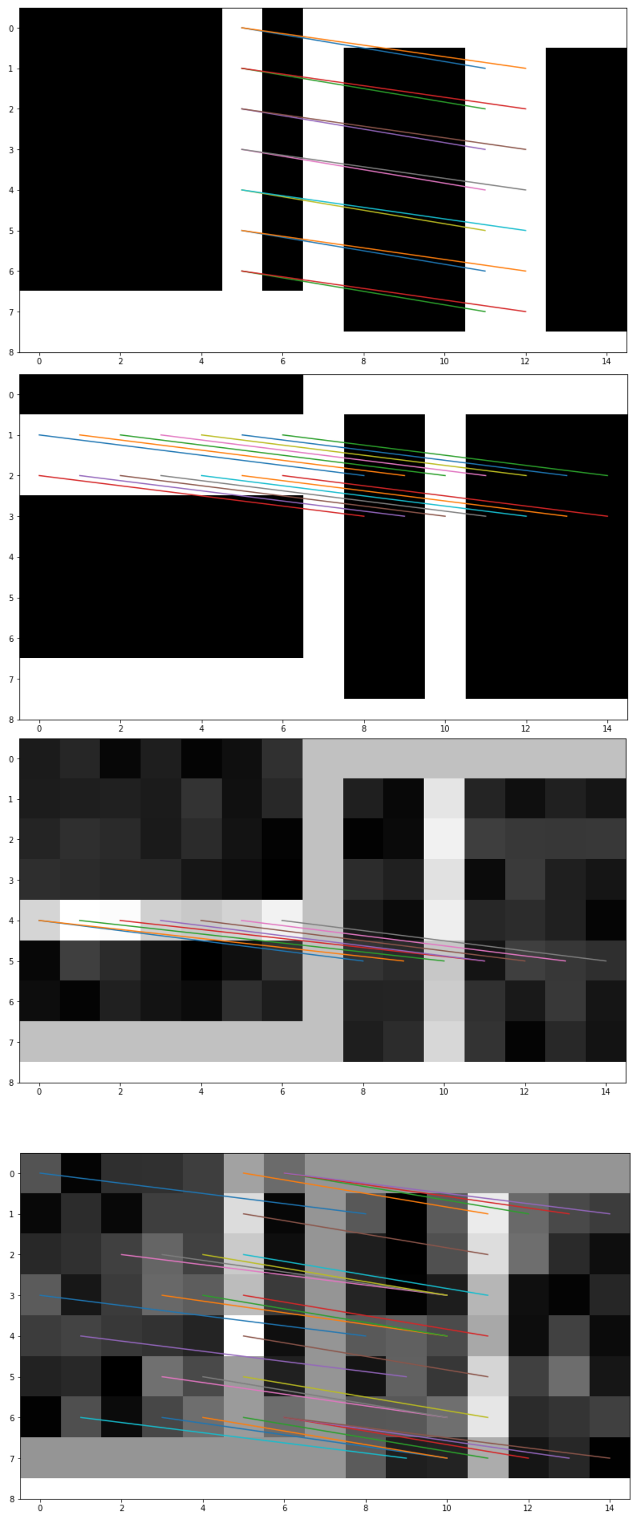

Рис. 1: Визуализация выравнивающего пути для модельных объектов двух классов.

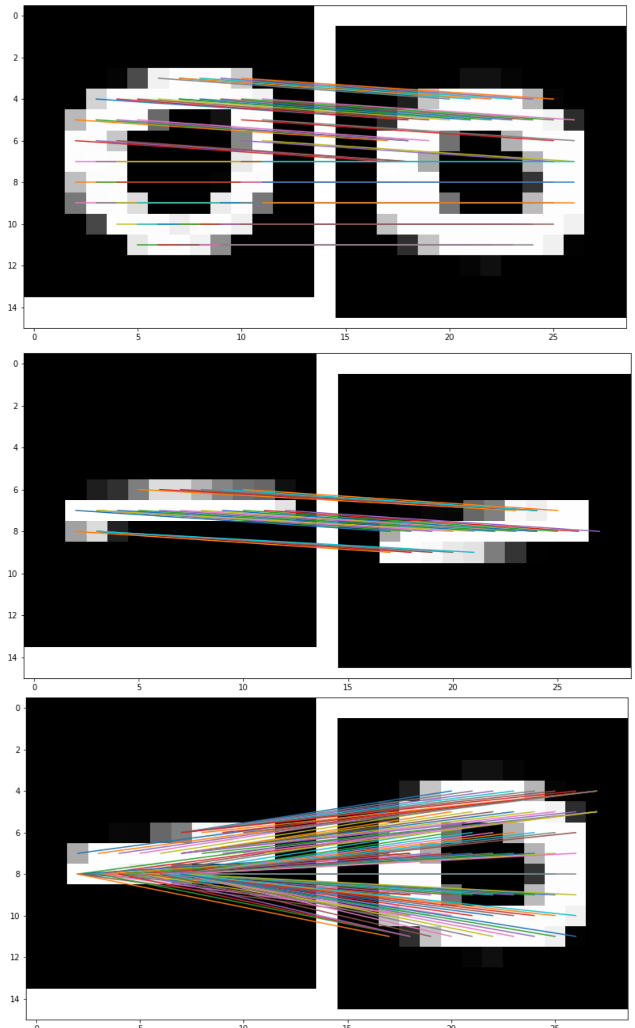

Рис. 2: Визуализация выравнивающего пути для объектов классов 0 и 1.

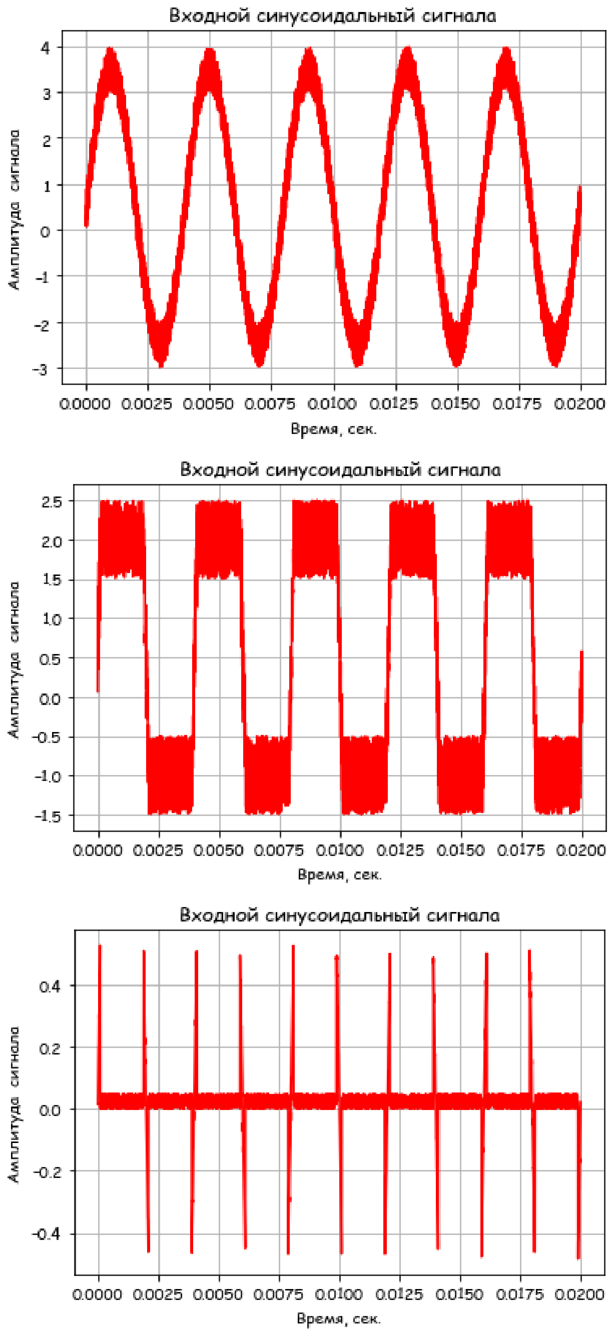

Рис. 3: Визуализация временных рядов для получения спектра сигнала.

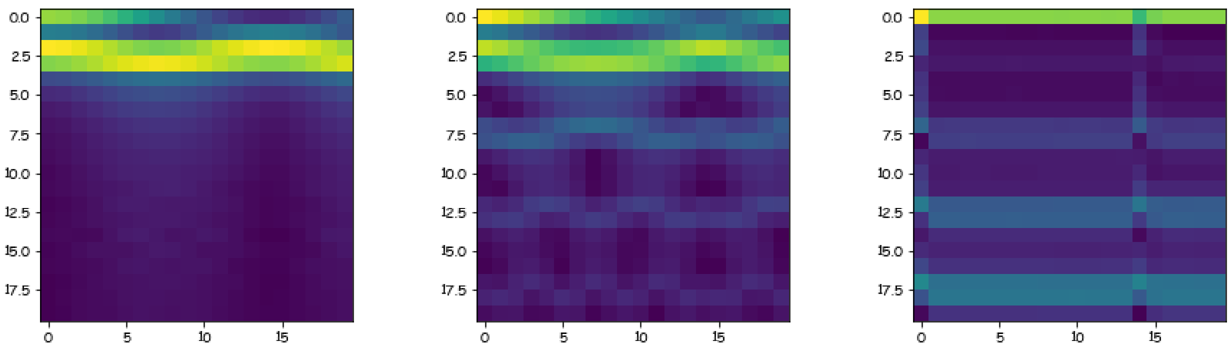

Рис. 4: Визуализация примеров объектов-спектров сигнала.