Оптимальная коррекция метрических нарушений в матрицах парных сравнений*

С. Д. Двоенко, Д. О. Пшеничный
sergedv@yandex.ru; denispshenichny@yandex.ru
Тульский государственный университет, г. Тула

В задачах интеллектуального анализа экспериментальные данные часто представлены результатами парных сравнений объектов между собой. В отсутствие исходного признакового пространства условием корректного погружения множества объектов в метрическое пространство является неотрицательная определенность матрицы парных сравнений элементов множества друг с другом. В этом случае близости интерпретируются как скалярные произведения, а соответствующие различия — как расстояния. В работе предлагается способ коррекции нормированных матриц парных близостей с тем, чтобы скорректированная матрица была положительно определенной и минимально отличающейся от исходной.

Ключевые слова: парные сравнения; собственные значения; метрика; детерминант; матрица

Optimal correction of metrical violations in matrices of pairwise comparisons*

S. D. Dvoenko, D. O. Pshenichny
Tula State University, Tula

Background: In modern data mining, experimental data are usually represented as objects' mutual pairwise comparisons. The condition of correct immersion of set objects in metrical space in the absence of the initial feature space is nonnegative definiteness of matrix of pairwise comparisons between these objects. In this case, similarities are interpreted as scalar products and dissimilarities as distances.
Methods: This paper suggests a method of correction for normalized matrices of similarities; so, the corrected matrix is positively definite and minimally deviated from the initial one.
Results: The proposed method detects objects, which contribute violations in the metrics. Pairwise comparisons of these objects with subset of other objects are corrected. This approach also allows to choose this subset of elements. It is proved that such a correction always exists and can be optimal.
Concluding Remarks: In contrast to traditional approach based on Karhunen–Loeve discrete decomposition, the proposed method is able to correct only few of matrix elements.

Keywords: pairwise comparisons; eigenvalues; metrics; determinant; matrix

Введение

Условием корректного погружения множества в метрическое пространство является неотрицательная определенность матрицы парных близостей его элементов [1]. В этом случае, применяя соответствующие «беспризнаковые» версии алгоритмов машинного обучения и кластер-анализа [2, 3] к матрице сходства или к соответствующей ей матрице различий, мы получим математически корректный результат обработки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 13-07-00010.

В данной работе рассматривается подход к регулируемой коррекции матриц парных сравнений с целью устранения метрических нарушений. Предполагается, что элементы множества, представленные матрицей парных сравнений, требуется погрузить в некоторое метрическое пространство, например, евклидово.

Предлагаемый в работе подход — это развитие идей, описанных в [4, 5]. В работе [4] нами был предложен метод коррекции нормированных матриц парных близостей. Он основан на последовательном погружении элементов множества в специальным образом построенное координатное пространство, где корректное положение очередного добавляемого элемента определяется относительно всех ранее добавленных элементов радиусом соответствующей гиперсферы всех возможных его положений.

В такой процедуре главный минор нормированной матрицы парных близостей уменьшается, начиная с единицы, оставаясь положительным, при добавлении очередного элемента множества. Если на множестве элементов возникают метрические нарушения, то главный минор текущего размера оказывается знакопеременным, постепенно уменьшаясь по модулю. Отрицательность очередного главного минора означает, что очередной добавленный элемент множества внес метрическое нарушение. Его следует исправить, корректируя значения парных сравнений нового элемента с предыдущими элементами до получения неотрицательного главного минора текущего размера.

В [4] показан метод коррекции всех парных сравнений вносящего метрические нарушения элемента. В работе [5] описан метод, позволяющий корректировать лишь одно парное сравнение такого элемента. В данной работе предложен метод, позволяющий корректировать произвольное подмножество парных сравнений нарушающего элемента с остальными минимальным образом.

Практика показывает, что просмотр главных миноров в их исходном порядке приводит к тому, что приходится корректировать большое число строк и столбцов матрицы. Чтобы уменьшить это количество, было предложено найти такую ранжировку объектов, что первый отрицательный главный минор соответствующей ранжировке матрицы близостей находился бы как можно ближе к концу последовательности миноров. Способ получения такой ранжировки описан в [5].

Задача оптимальной коррекции метрических нарушений

Пусть имеется нормированная матрица парных близостей $S(n,n)$, для элементов которой выполняются следующие условия: все диагональные элементы равны единице ($s_{ii}=1$, $i=1,\dots,n$), все элементы симметричны относительно главной диагонали ($s_{ij}=s_{ji}$, $i,j=$ $=1,\dots,n$), все элементы матрицы не превышают по модулю единицы ($|s_{ij}|\leqslant 1$). Требуется разработать алгоритм, позволяющий для этой матрицы найти такую матрицу $S'(n,n)$, что она также будет иметь единичную главную диагональ, симметричные относительно нее и не превосходящие по модулю единицы элементы, при этом она будет положительно определенной, а отклонение ее от S будет в некотором смысле минимальным. Очевидно, что если матрица S является положительно определенной, то получаемая в результате работы алгоритма матрица S' должна в точности совпадать с S. Далее мы будем рассматривать матрицу S и ее миноры, поэтому там, где это не вызывает затруднений, будем обозначать значение минора как и сам минор.

Оптимальная коррекция заданных парных сравнений

Как и ранее, будем просматривать главные миноры $S_k=S(k,k)$, $k=1,\dots,n$ матрицы $S(n,n)$ по порядку. Если очередной минор S_k оказывается отрицательным, то скорректируем элементы его последней строки и столбца, индексы которых принадлежат множеству $A \subseteq \{1, \ldots, k-1\}$, и продолжим просмотр. Рассмотрим случай, когда главный минор $S_k < 0$, а все предыдущие главные миноры $S_i > 0, i = 1, \ldots, k-1$.

Вычислим значение этого минора, используя разложение определителя по последней строке и последнему столбцу, и, выполняя преобразования, получим выражение:

$$S_k = S_{k-1}\left(1 - \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} s_{ki}s_{jk}r_{ij}\right), \tag{1}$$

где r_{ij} — элемент (i, j) матрицы $R = S(k-1, k-1)^{-1}$, являющейся обратной матрице $S(k-1, k-1)$, получающейся при взятии первых $k-1$ строк и $k-1$ столбцов матрицы S.

По условию значение минора S_k отрицательно $S_k < 0$. Пусть мы хотим скорректировать минор S_k так, чтобы его значение стало равно некоторому заданному числу $\tilde{C}$, где $0 < \tilde{C} < S_{k-1}$.

Обозначим эти искомые элементы s_{ki}, s_{ik} матрицы S_k как $x_i, i = 1, \ldots, k-1$, которые будут соответствовать скорректированным значениям элементов минора S_k. Согласно (1), получим условие, налагаемое на элементы последней строки и столбца минора S_k:

$$\sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} x_i x_j r_{ij} = C, \tag{2}$$

где $C = 1 - \tilde{C}/S_{k-1}$.

Так как мы хотим иметь минимальное отклонение скорректированных элементов от исходных, то (2) — это ограничение равенства в следующей задаче оптимизации:

$$\left.\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &= \sum_{i=1}^{k-1}(s_{ik} - x_i)^2 \to \min \\ g(\boldsymbol{x}) &= \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} x_i x_j r_{ij} = C. \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

Решая (3) методом множителей Лагранжа, получаем, что требуется решить следующую систему уравнений:

$$\left.\begin{aligned} &\lambda \sum_{i=1, i\in A}^{k-1} x_i r_{ip} + \sum_{i=1, i\notin A}^{k-1} s_{ki} r_{ip} = s_{kp} - x_p, p \in A \\ &\sum_{i=1, i\in A}^{k-1}\sum_{j=1, j\in A}^{k-1} x_i x_j r_{ij} + + \sum_{i=1, i\in A}^{k-1}\sum_{j=1, j\notin A}^{k-1} x_i s_{jk} r_{ij} + \\ &\qquad + \sum_{i=1, i\notin A}^{k-1}\sum_{j=1, j\in A}^{k-1} s_{ki} x_j r_{ij} + \sum_{i=1, i\notin A}^{k-1}\sum_{j=1, j\notin A}^{k-1} s_{ki} x_{jk} r_{ij} = C. \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

Количество уравнений в этой системе зависит от индексов, образующих множество A, т.е. от того, сколько элементов последней строки и столбца минора S_k требуется скорректировать. От того, какие именно элементы последней строки и столбца минора S_k корректируются, зависит состав первых $|A|$ уравнений системы (4).

Решая эту систему численным методом решения систем алгебраических уравнений, получим оптимально скорректированную строку и столбец минора.

Эксперименты

Проведем эксперименты над двумя нормированными матрицами парных близостей. Пусть первая из них — модельная матрица

$$S(3,3) = \begin{pmatrix} 1 & 0{,}5 & 0{,}5 \\ 0{,}5 & 1 & -0{,}9 \\ 0{,}5 & -0{,}9 & 1 \end{pmatrix}$$

с главными минорами $S_1 = 1, S_2 = 0.75, S_3 = -0.76$. Поправим предложенным методом последнюю строку и столбец целиком так, чтобы третий минор стал равен $\tilde{C} = 0.1$.

Вычислим сначала матрицу $R = S(2,2)^{-1} = \begin{pmatrix} 4/3 & -2/3 \\ -2/3 & 4/3 \end{pmatrix}$. Далее вычислим $C = 13/15$. Получим систему уравнений:

$$\begin{cases} \lambda\left(\dfrac{4}{3}x_1 - \dfrac{2}{3}x_2\right) = 0{,}5 - x_1\,; \\ \lambda\left(-\dfrac{2}{3}x_1 + \dfrac{4}{3}x_2\right) = -0{,}9 - x_2\,; \\ \dfrac{4}{3}x_1^2 - \dfrac{4}{3}x_1x_2 + \dfrac{4}{3}x_2^2 = \dfrac{13}{15}. \end{cases}$$

Решая ее, получаем $x_1 = 0.285487, x_2 = -0.624637$. Подставив эти значения в исходную матрицу, убедимся, что ее определитель равен 0.1.

Теперь скорректируем предложенным методом только первый элемент последней строки и столбца матрицы $S(3,3)$. Мы также хотим, чтобы значение определителя скорректированной матрицы было равно 0.1. Получим систему уравнений:

$$\begin{cases} \lambda\left(\dfrac{4}{3}x_1 - \dfrac{2}{3}\cdot(-0.9)\right) = 0{,}5 - x_1 \\ \dfrac{4}{3}x_1^2 - \dfrac{4}{3}x_1\cdot(-0.9) + \dfrac{4}{3}\cdot(-0{,}9)^2 = \dfrac{13}{15}\,. \end{cases}$$

Решая эту систему, получаем $x_1 = -0{,}243845$. Подставив эти значения в исходную матрицу, убедимся, что ее определитель также равен 0.1.

Наконец скорректируем описанным методом только второй элемент последней строки и столбца матрицы $S(3,3)$ так, чтобы ее определитель снова стал равен 0,1.

Теперь требуется решить такую систему уравнений:

$$\begin{cases} \lambda\left(-\dfrac{2}{3}\cdot 0{,}5 + \dfrac{4}{3}x_2\right) = -0{,}9 - x_2\,; \\ \dfrac{4}{3}\cdot 0{,}5^2 - \dfrac{4}{3}\cdot 0{,}5x_2 + \dfrac{4}{3}x_2^2 = \dfrac{13}{15}. \end{cases}$$

Также решая эту систему, получаем $x_2 = -0.430074$. Подставив эти значения в исходную матрицу, убедимся, что ее определитель снова равен 0.1.

Второй эксперимент поставлен на матрице данных $S(11,11)$, которая является корреляционной матрицей статистических взаимосвязей между энергетическими свойствами биоритмов головного мозга для 11 частот (тета-, альфа-, бета-ритмы энцефалограммы головного мозга), полученных В. Д. Небылицыным в ходе исследований по эффекту навязывания ритма [7]:

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0{,}562 & 0{,}568 & 0{,}152 & 0{,}347 & 0{,}250 & 0{,}264 & -0{,}020 & -0{,}212 & -0{,}086 & -0{,}076 \\
0{,}562 & 1 & 0{,}784 & 0{,}057 & 0{,}196 & 0{,}218 & 0{,}009 & -0{,}017 & -0{,}002 & 0{,}163 & 0{,}284 \\
0{,}568 & 0{,}784 & 1 & 0{,}288 & 0{,}475 & 0{,}264 & 0{,}066 & 0{,}144 & 0{,}114 & 0{,}228 & 0{,}151 \\
0{,}152 & 0{,}057 & 0{,}288 & 1 & 0{,}686 & 0{,}293 & 0{,}034 & 0{,}048 & -0{,}069 & -0{,}064 & 0{,}175 \\
0{,}347 & 0{,}196 & 0{,}475 & 0{,}686 & 1 & 0{,}429 & 0{,}070 & 0{,}152 & 0{,}036 & 0{,}028 & 0{,}216 \\
0{,}250 & 0{,}218 & 0{,}264 & 0{,}293 & 0{,}429 & 1 & 0{,}788 & 0{,}197 & 0{,}154 & 0{,}109 & 0{,}035 \\
0{,}264 & 0{,}009 & 0{,}066 & 0{,}034 & 0{,}070 & 0{,}788 & 1 & 0{,}109 & 0{,}054 & -0{,}002 & -0{,}018 \\
-0{,}020 & -0{,}017 & 0{,}144 & 0{,}048 & 0{,}152 & 0{,}197 & 0{,}109 & 1 & 0{,}807 & 0{,}830 & 0{,}699 \\
-0{,}212 & -0{,}002 & 0{,}114 & -0{,}069 & 0{,}036 & 0{,}154 & 0{,}054 & 0{,}807 & 1 & 0{,}904 & 0{,}728 \\
-0{,}086 & 0{,}163 & 0{,}228 & -0{,}064 & 0{,}028 & 0{,}109 & -0{,}002 & 0{,}830 & 0{,}904 & 1 & 0{,}768 \\
-0{,}076 & 0{,}284 & 0{,}151 & 0{,}175 & 0{,}216 & 0{,}035 & -0{,}018 & 0{,}699 & 0{,}728 & 0{,}768 & 1
\end{pmatrix}.
$$

Данная матрица содержит 10 положительных и одно отрицательное собственное число.

Сначала был выполнен поиск оптимальной ранжировки, в результате которого получилась следующая перестановка элементов множества: 7, 4, 8, 1, 3, 11, 5, 9, 6, 10, 2. Главные миноры матрицы, соответствующей оптимальной ранжировке, имеют следующие значения: 1,000000, 0,998844, 0,985015, 0,893156, 0,539420, 0,255770, 0,108704, 0,024602, 0,004752, 0,000481, −0,000057.

Таким образом, оказалось, что последний элемент в данной ранжировке вносит метрическое нарушение. В исходной перестановке элементов множества это второй элемент. Скорректируем все элементы последней строки и столбца матрицы, соответствующей полученной перестановке так, чтобы полученное значение минора составляло примерно 0,1 от значения предыдущего минора S_{10}. Пусть $S'_{11} = 0{,}00005$. В результате коррекции и обратной перестановки строк и столбцов матрицы была получена следующая скорректированная матрица (жирным в ней выделены измененные элементы):

$$
\begin{pmatrix}
1 & \mathbf{0{,}552} & 0{,}568 & 0{,}152 & 0{,}347 & 0{,}250 & 0{,}264 & -0{,}020 & -0{,}212 & -0{,}086 & -0{,}076 \\
\mathbf{0{,}552} & 1 & \mathbf{0{,}759} & \mathbf{0{,}065} & \mathbf{0{,}213} & \mathbf{0{,}191} & \mathbf{0{,}030} & \mathbf{-0{,}006} & \mathbf{0{,}009} & \mathbf{0{,}169} & \mathbf{0{,}254} \\
0{,}568 & \mathbf{0{,}759} & 1 & 0{,}288 & 0{,}475 & 0{,}264 & 0{,}066 & 0{,}144 & 0{,}114 & 0{,}228 & 0{,}151 \\
0{,}152 & \mathbf{0{,}065} & 0{,}288 & 1 & 0{,}686 & 0{,}293 & 0{,}034 & 0{,}048 & -0{,}069 & -0{,}064 & 0{,}175 \\
0{,}347 & \mathbf{0{,}213} & 0{,}475 & 0{,}686 & 1 & 0{,}429 & 0{,}070 & 0{,}152 & 0{,}036 & 0{,}028 & 0{,}216 \\
0{,}250 & \mathbf{0{,}191} & 0{,}264 & 0{,}293 & 0{,}429 & 1 & 0{,}788 & 0{,}197 & 0{,}154 & 0{,}109 & 0{,}035 \\
0{,}264 & \mathbf{0{,}030} & 0{,}066 & 0{,}034 & 0{,}070 & 0{,}788 & 1 & 0{,}109 & 0{,}054 & -0{,}002 & -0{,}018 \\
-0{,}020 & \mathbf{-0{,}006} & 0{,}144 & 0{,}048 & 0{,}152 & 0{,}197 & 0{,}109 & 1 & 0{,}807 & 0{,}830 & 0{,}699 \\
-0{,}212 & \mathbf{0{,}009} & 0{,}114 & -0{,}069 & 0{,}036 & 0{,}154 & 0{,}054 & 0{,}807 & 1 & 0{,}904 & 0{,}728 \\
-0{,}086 & \mathbf{0{,}169} & 0{,}228 & -0{,}064 & 0{,}028 & 0{,}109 & -0{,}002 & 0{,}830 & 0{,}904 & 1 & 0{,}768 \\
-0{,}076 & \mathbf{0{,}254} & 0{,}151 & 0{,}175 & 0{,}216 & 0{,}035 & -0{,}018 & 0{,}699 & 0{,}728 & 0{,}768 & 1
\end{pmatrix},
$$

где евклидово расстояние между полученной матрицей и исходной составило 0,058.

Теперь скорректируем отрицательный минор методом коррекции всего вектора парных сравнений, который ранее был нами предложен [4]. Значение евклидова расстояния между исходной матрицей и скорректированной данным способом составило 0.058 (при этом значение определителя скорректированной матрицы составило 0,0000005). Наконец, если в отрицательном миноре скорректировать только одиночный элемент $s_{11,1}$, то отклонение составит 0,088.

Таким образом, предложенный метод на данной матрице действительно обеспечивает оптимальный результат коррекции.

Заключение

В данной работе предложен алгоритм коррекции неположительно определенных матриц парных близостей. Этот алгоритм позволяет определить, какие объекты вносят наибольшее искажение в метрику пространства и скорректировать их парные сравнения.

Предложенный метод корректировки парных сравнений объекта позволяет найти наиболее близкие скорректированные парные сравнения к значениям исходных парных сравнений, при этом вклад в нарушение этим объектом метрического пространства будет уменьшен, причем величина этого вклада может регулироваться.

Предложенный метод позволяет корректировать не все парные сравнения объекта, а лишь некоторые, оставляя неизменными значения остальных парных сравнений. Данный метод является обобщением ранее описанных метода коррекции всего вектора парных сравнений и метода коррекции одиночных элементов.

Литература

[1] *Young G., Householder A. S.* Discussion of a set of points in terms of their mutual distances // *Psychometrica*, 1938. Vol. 3. No. 1. P. 19–22.

[2] *Двоенко С. Д.* Распознавание элементов множества, представленных взаимными расстояниями и близостями // ММРО-14. — М.: МАКС Пресс, 2009. С. 112-–115.

[3] *Двоенко С. Д.* Кластеризация множества, описанного парными расстояниями и близостями между его элементами // Сибирский журнал индустриальной математики, 2009. Т. 12. № 1(37). С. 61-–73.

[4] *Двоенко С. Д., Пшеничный Д. О.* Об устранении отрицательных собственных значений матриц парных сравнений // ИОИ-2012. — М.: Торус Пресс, 2012. С. 13-–16.

[5] *Двоенко С. Д., Пшеничный Д. О.* О метрической коррекции матриц парных сравнений // Машинное обучение и анализ данных, 2013. Т. 1. № 5. С. 606–620.

[6] *Гантмахер Ф. Р.* Теория матриц. — М.: Наука, 1967. 576 с.

[7] *Небылицын В. Д.* Главные характеристики нервной системы. — М.: Просвещение, 1966.

References

[1] *Young G., Householder A. S.* 1938. Discussion of a set of points in terms of their mutual distances. *Psychometrica* 3(1):19-–22.

[2] *Dvoenko S. D.* 2009. Recognition of the set elements presented by mutual distances and similarities. *14th Conference "Mathematicial Methods of Pattern Recognition" Proceedings*. Moscow: MAKS Press. 112-–115.

[3] *Dvoenko S. D.* 2009. Clusterization of the set presented by distances and similarities between its elements. *Syberian J. Industrial Mathematics* 12(1(37)):61-–73. [In Russian.]

[4] *Dvoenko S. D., Pshenichny D. O.* 2012. On negative eigenvalues removing from matrixes of pairwise comparisons. *9th Conference (International) "Intellectualization of Information Processing" Proceedings*. Moscow: TORUS PRESS. 13–16. [In Russian.]

[5] *Dvoenko S. D., Pshenichny D. O.* 2013. On metrical correction of the matrices of pairwise comparisons. *JMLDA* 1(5):606–620.

[6] *Gantmacher F. R.* 2000. The theory of matrices. AMS Chelsea Publishing. 660 p.

[7] *Nebylitsyn V. D.* 1966. Main characteristics of the nervous system. Moscow: Prosveshchenie. [In Russian.]