Обусловленность матриц парных сравнений при коррекции метрических нарушений*

С. Д. Двоенко, Д. О. Пшеничный
sergedv@yandex.ru; denispshenichny@yandex.ru
Тульский государственный университет, Россия, г. Тула, пр. Ленина, 92

В интеллектуальном анализе данных результаты исследований часто представлены в виде парных сравнений сходства или различия объектов. Для корректного применения алгоритмов машинного обучения результаты парных сравнений необходимо погрузить в метрическое пространство. Одним из условий корректного погружения является неотрицательная определенность матрицы парных близостей элементов множества друг с другом. В этом случае неотрицательные близости интерпретируются как скалярные произведения векторов в положительном квадранте гипотетического признакового пространства, а соответствующие различия представляют собой расстояния. На практике применяют различные способы оценки сходства или различия элементов множества. Во многих случаях такие функции сравнения не обладают свойствами функций близостей или расстояний, поэтому возникает необходимость в метрической коррекции произвольных экспериментальных матриц парных сравнений для обеспечения положительной определенности соответствующих им нормированных матриц скалярных произведений. Но естественное требование минимизации отклонений значений скорректированных матриц от их исходных значений обычно приводит к плохо обусловленным матрицам скалярных произведений с большим числом обусловленности. В данной работе исследуется обусловленность скорректированных матриц скалярных произведений.

Ключевые слова: *метрика; детерминант; собственное число; собственный вектор; скалярное произведение; парные сравнения*

DOI: 10.21469/22233792.3.1.04

1 Задача коррекции метрических нарушений

Рассмотрим нормированную матрицу скалярных произведений $S(n,n)$, для элементов которой выполняются условия: $s_{ii}=1,\ i=1,\ldots,n$; $s_{ij}=s_{ji}$, $|s_{ij}|\leqslant 1$, $i,j=1,\ldots,n$, где n — число элементов множества. Такая матрица может быть получена по теореме косинусов из матрицы расстояний $D(n,n)$ между элементами множества относительно некоторого начала координат.

Непосредственно оценивая сходство элементов множества между собой, обычно применяют различные функции сходства, получая матрицы парных близостей $S(n,n)$ с неотрицательными элементами $s_{ij}\geqslant 0$. Неотрицательные значения $s_{ij}\geqslant 0$ рассматриваются как скалярные произведения элементов множества, представленных векторами в положительном квадранте соответствующего неизвестного нам гипотетического признакового пространства.

Одним из условий отсутствия метрических нарушений в конфигурации множества элементов, помещенных в некоторое пространство, является неотрицательная определенность матрицы их взвешенных скалярных произведений. Если такими свойствами обладает произвольная матрица близостей $S(n,n)$, то считается, что элементы данного множества корректно погружены в метрическое пространство, размерность которого не превышает n.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 17-07-00319.

В этом случае совершенно необязательно иметь признаковое пространство в явном виде как набор измерений соответствующих характеристик, чтобы применить алгоритмы машинного обучения, кластер-анализа и т. д.

Но часто оказывается, что экспериментальная матрица сходства элементов множества между собой неположительно определена. Это не позволяет считать, что соответствующее множество элементов может быть представлено точками в некотором неизвестном нам признаковом пространстве. Для математически корректной обработки таких наблюдений в виде близостей необходимо скорректировать некоторые парные близости, чтобы все множество элементов оказалось погруженным в метрическое пространство. Только в этом случае мы можем быть уверены, что при «внезапном» появлении признакового пространства результаты обработки не изменятся.

В итоге, для заданной матрицы парных сравнений сходства или различия, для которой соответствующая матрица нормированных скалярных произведений неположительно определена, требуется так скорректировать значения скалярных произведений, чтобы восстановить ее положительную определенность при минимальных в некотором смысле отклонениях скорректированных значений ряда ее элементов от исходных.

Проблемы преобразования произвольных матриц парных сравнений к нормированному виду и некоторые вопросы их коррекции были ранее рассмотрены в [1–3]. Разработка алгоритмов классификации по матрицам парных сравнений была рассмотрена в [4, 5].

В [6] была сформулирована общая постановка задачи оптимальной коррекции значений нормированной матрицы скалярных произведений для элемента, нарушающего метричность конфигурации, при условии минимизации суммы квадратов отклонений скорректированных сравнений данного элемента с остальными от исходных сравнений.

К сожалению, такое естественное требование приводит к нулевому детерминанту скорректированной матрицы, что, как минимум, говорит о некорректной вложенности множества в гипотетическое пространство избыточной размерности, поэтому необходимо обеспечить некоторое небольшое, но положительное значение детерминанта скорректированной матрицы. Вопрос его выбора немедленно приводит к проблеме обусловленности матрицы парных сравнений сходства.

В данной работе рассматривается проблема определения оптимального числа обусловленности матрицы нормированных скалярных произведений при решении задачи ее метрической коррекции.

2 Обусловленность матрицы парных сравнений

Известно, что число обусловленности квадратной матрицы показывает степень ее вырожденности. Если квадратная матрица A является матрицей коэффициентов некоторой системы линейных уравнений $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ и почти вырождена, то малые изменения A и $\mathbf{b}$ вызовут большие изменения в решении $\mathbf{x}$. Если матрица коэффициентов невырождена (например, близка к единичной), то малые изменения A и $\mathbf{b}$ повлекут только малые изменения в решении $\mathbf{x}$. Невырожденная квадратная матрица характеризуется небольшим числом обусловленности.

Рассмотрим квадратную матрицу S. Известно, что ее число обусловленности может быть определено как произведение норм ее и обратной ей матриц $\mathrm{Cond}\,(S) = ||S|| \cdot ||S^{-1}||$. Норма матрицы может быть определена различными способами, например как максимальное по модулю собственное число $||S|| = \max|\lambda|$. Норма обратной матрицы окажется $||S^{-1}|| = 1/\min|\lambda|$, так как собственные числа обратной матрицы обратны собственным числам исходной матрицы.

Для положительно определенной матрицы $S(n,n)$ ее число обусловленности $\mathrm{Cond}\,(S(n,n)) = \lambda_1/\lambda_n$, где $\lambda_{\max} = \lambda_1 > \cdots > \lambda_n = \lambda_{\min} > 0$. Заметим, что метрические нарушения приводят к появлению отрицательных собственных чисел, а коррекция их устраняет. Поэтому такое определение числа обусловленности является приемлемым в задаче коррекции.

В то же время, другие возможные определения норм матрицы могут и не подойти, например $\max|s_{ij}|$, так как здесь данный элемент может вообще не измениться при коррекции. Такая коррекция никак не отразится на числе обусловленности.

К сожалению, для скорректированной матрицы $S(n,n)$ ее число обусловленности $\mathrm{Cond}\,(S(n,n))$ никак не связано явно со значением ее детерминанта $S_n = \det S(n,n)$, хотя известно, что $S_n = \prod_{i=1}^n \lambda_i$. Действительно, из условия $n = \sum_{i=1}^n \lambda_i$ можно лишь утверждать, что $\lambda_{\max} = \lambda_1 > 0$ уменьшится, если остальные собственные числа не изменятся при возрастании $\lambda_{\min}$, когда оно станет положительным: $\lambda_{\min} = \lambda_n > 0$. Отсюда число обусловленности $\mathrm{Cond}\,(S(n,n)) = \lambda_1/\lambda_n$ снизится, а обусловленность матрицы $S(n,n)$ улучшится.

Очевидно, что наилучшее решение задачи коррекции, доставляющее минимум отклонения от $S_n < 0$, определяет значение $S_n = 0$. Также очевидно, что такое решение неприемлемо, так как $\lambda_{\min} = \lambda_n = 0$, а $\mathrm{Cond}\,(S(n,n)) = \infty$. Как было отмечено выше, указанное противоречие необходимо разрешить, позволив сильнее скорректировать элементы последней строки и столбца матрицы $S(n,n)$.

С другой стороны, значение S_n детерминанта скорректированной матрицы $S(n,n)$ не может превысить значения предыдущего минора $S_n \leqslant S_{n-1}$. Если же результат коррекции $S_n = S_{n-1}$, то по правилу вычисления детерминанта как разложения по элементам последней строки следует, что эта строка должна быть нулевой, как и последний столбец, в силу симметричности $s_{ni} = s_{in} = 0,\ i = 1,\ldots,n$. В этом случае число обусловленности минимально $\mathrm{Cond}\,(S(n,n)) = \mathrm{Cond}\,(S(n-1,n-1))$ для данной матрицы. Но также очевидно, что такая коррекция неприемлема из-за недопустимо большого расхождения между исходными и новыми значениями элементов скорректированной матрицы $S(n,n)$.

3 Оптимальная коррекция парных сравнений

Рассмотрим последовательность главных миноров $S(1,1) = 1,\ S(2,2),\ldots,S(k,k),\ldots$ $\ldots,S(n,n)$ нормированной матрицы скалярных произведений $S(n,n)$. Их значения $S_1 = 1,\ldots,\ S_k = \det S(k,k),\ldots,S_n = \det S(n,n)$ убывают, оставаясь положительными при добавлении очередного элемента множества, не нарушающего метрическую конфигурацию. Если имеются метрические нарушения, то такая последовательность миноров оказывается знакопеременной с уменьшающимися по модулю значениями. Тогда отрицательность значения $S_k < 0$ минора $S(k,k)$ означает, что очередной добавленный элемент, представленный своими парными сравнениями $s_{ki} = s_{ik},\ i = 1,\ldots,k$, внес метрическое нарушение, которое требуется исправить так, чтобы получить $S_k > 0$.

Вычислим значение S_k минора $S(k,k)$. Для этого разложим его по элементам последней строки:

$$S_k = \sum_{i=1}^{k} (-1)^{k+i} s_{ki} (S_k)_i^k = \sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{k+i} s_{ki} (S_k)_i^k + S_{k-1}\ ,$$

где $(S_k)_i^k$ — значение минора $(S(k,k))_i^k$, полученного из минора $S(k,k)$ удалением строки k и столбца i. Далее разложим минор $(S(k,k))_i^k$ по последнему столбцу и вычислим его:

$$(S_k)_i^k = \sum_{j=1}^{k-1} (-1)^{j+k-1} s_{jk} ((S_k)_i^k)_k^j \,.$$

После подстановки этого разложения с учетом $(-1)^{2k-1} = -1$ получим:

$$S_k = \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} (-1)^{k+i} s_{ki} (-1)^{j+k-1} s_{jk} (S_{k-1})_i^j + S_{k-1} = S_{k-1} - \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} s_{ki} s_{jk} (-1)^{i+j} (S_{k-1})_i^j \,.$$

Если рассмотреть матрицу $S(k-1,\ k-1)$ и обратную ей $R = S^{-1}(k-1,\ k-1)$, то для матрицы $R(k-1,\ k-1)$ вычисление ее элементов дает значения $r_{ij} = (-1)^{i+j}(S_{k-1})_i^j / S_{k-1}$. Отсюда окончательно получим:

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

Пусть $S_k < 0$ при $S_i > 0,\ i = 1,\ldots,k-1$. Скорректируем некоторые элементы последних строки k и столбца k текущего минора, индексы которых образуют множество $I \subseteq \{1,\ldots,k-1\}$. Пусть после коррекции $S_k = \tilde{C}$, где $0 < \tilde{C} < S_{k-1}$. Обозначим элементы $s_{ki} = s_{ik}$ скорректированной матрицы $S(k,k)$ как переменные $x_i,\ i = 1,\ldots,k-1$, и, согласно (1), получим ограничения на их значения:

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

где для индексов $i \notin I$ элементы $x_i = s_{ki} = s_{ik}$ остаются неизменными.

Минимизация отклонений скорректированных элементов при заданном ограничении (2) приводит к следующей задаче оптимизации:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (s_{ik} - x_i)^2 \to \min; \ \ \sum_{i=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{k-1} x_i x_j r_{ij} = C \,. \tag{3}$$

Для задачи (3) по методу множителей Лагранжа получим систему уравнений:

$$\left.\begin{aligned} \lambda \sum_{i\in I} x_i r_{ip} + \sum_{i\notin I} s_{ki} r_{ip} = s_{kp} - x_p, \quad p \in I\,; \\ \sum_{i\in I}\sum_{j\in I} x_i x_j r_{ij} + \sum_{i\in I}\sum_{j\notin I} x_i s_{jk} r_{ij} + \sum_{i\notin I}\sum_{j\in I} s_{ki} x_j r_{ij} + \sum_{i\notin I}\sum_{j\notin I} s_{ki} s_{jk} r_{ij} = C \,. \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

Решая данную систему численным методом, получим оптимально скорректированные строку и столбец данного минора. Количество уравнений в системе (4) зависит от индексов $p \in I$, т. е. от количества и состава корректируемых элементов.

Таким образом, величина C является параметром задачи оптимизации (3), который неявно связан с числом обусловленности.

Для согласования двух противоречивых требований (минимизации отклонений и минимизации числа обусловленности) предлагается эвристическая процедура построения с некоторым шагом из интервала $0 < \alpha < 1$ графиков изменения двух величин $\mathrm{Cond}_\alpha\left(S(k,k)\right)$ и $D_\alpha = \sum_{i=1}^{k-1}\left(s_{ik} - x_i\right)^2$ для параметра $C = 1-\alpha$ в задаче оптимизации (3), где $\tilde{C} = \alpha S_{k-1}$, α — доля значения минора S_{k-1}.

Для поиска оптимального числа обусловленности применим популярный эвристический способ совместного анализа графиков противоположно изменяющихся величин, приведенных к единому масштабу. Очевидно, что точка пересечения таких графиков претендует на оптимальность в эвристическом смысле. С другой стороны, формально численный поиск точки пересечения двух плавно изменяющихся функций осуществляется каким-либо из известных итерационных численных методов решения систем нелинейных уравнений [7].

4 Эксперименты на реальных данных

Рассмотрим корреляционную матрицу $S(11,11)$ статистических взаимосвязей между энергетическими свойствами биоритмов головного мозга для 11 частот (альфа-, бета- и тета-ритмы электроэнцефалограммы головного мозга), полученных В. Д. Небылицыным в его исследованиях по эффекту навязывания ритма светослуховыми ощущениями [8]:

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

Данная матрица содержит 10 положительных и одно отрицательное собственное число. Опыт показывает, что просмотр главных миноров в исходном порядке перечисления элементов множества обычно приводит к необходимости корректировать большое число строк (и одновременно таких же столбцов) матрицы. Это было названо нами эффектом шлейфа после коррекции [1–3]. Поэтому ранее было предложено найти такую ранжировку элементов множества, чтобы первый отрицательный главный минор матрицы близостей в соответствующей ранжировке элементов множества находился бы как можно ближе к концу последовательности миноров [2, 3].

Оптимальная ранжировка элементов дает следующую перестановку элементов: 7, 4, 8, 1, 3, 11, 5, 9, 6, 10, 2. Главные миноры в данной 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, в данной перестановке последний элемент вносит метрическое нарушение. Это второй элемент в исходном порядке элементов множества. Ранее в [6] была получена корректировка полной строкой, согласно методу коррекции, описанному здесь выше (скорректированные элементы показаны жирным шрифтом):

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

Легко заметить, что скорректированные значения воспринимаются вполне естественно. Задача была решена при $\tilde{C} = 0{,}1S_{10} = 0{,}1 \cdot 0{,}000481 \approx 0{,}00005$, где была получена величина отклонения $0{,}058$.

Проверим оптимальность полученного ранее решения, исследуя обусловленность скорректированной матрицы $S(11, 11)$. Построим сначала графики изменения величин Cond_α и D_α на всем диапазоне $0 < \alpha < 1$ при корректировке полной строкой по уравнениям (4), так как в этом случае можно получить предельное скорректированное значение минора $S_k = S_{k-1}$ при $\alpha = 1$ (рис. 1).

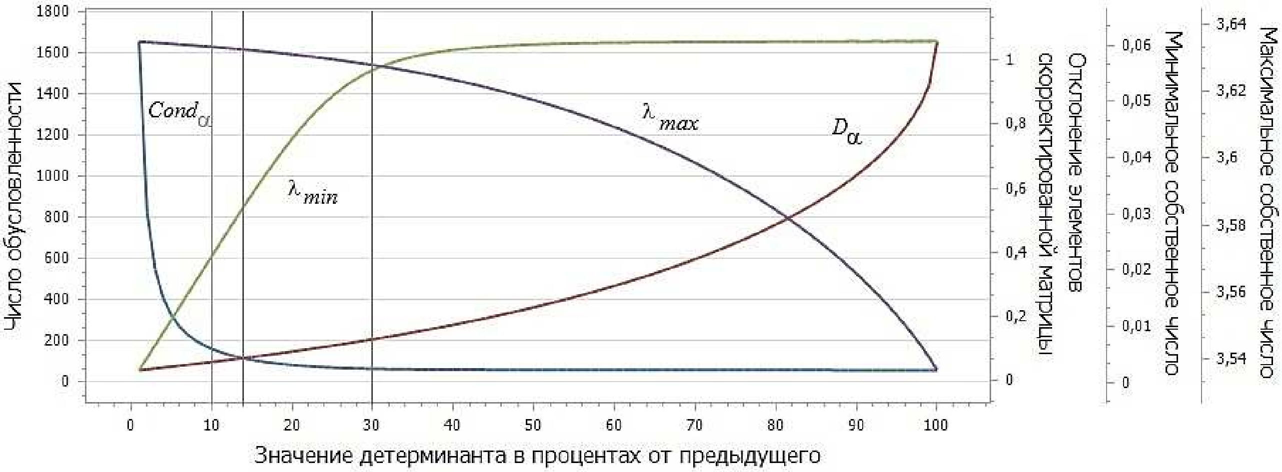


Рис. 1 Изменение числа обусловленности (Cond_α), отклонения (D_α), максимального ($\lambda_{\max}$) и минимального ($\lambda_{\min}$) собственных чисел скорректированной матрицы $S(11, 11)$ при изменении доли α значения ее детерминанта S_{11} от значения детерминанта $S_{10} = 0{,}000481$ минора $S(10, 10)$

Легко увидеть, что при доле $\alpha = 0{,}1$ число обусловленности уже значительно снижено до 162 с величины 1652,8 при $\alpha = 0{,}01$. Тем не менее, совместный анализ противоположно изменяющихся графиков Cond_α и D_α, приведенных к одному масштабу, указывает на другую эвристически оптимальную долю $\alpha = 0{,}14$ для числа обусловленности 116. И, наконец, по-видимому, вполне допустимо взять также долю вплоть до $\alpha = 0{,}3$, так как на этом интервале собственное число $\lambda_{\min}$ интенсивно нарастает. В то же время собственное число $\lambda_{\max}$ изменяется значительно медленнее, что и определяет монотонное уменьшение числа обусловленности еще почти в 2 раза до значения 65,26 (табл. 1).

Также сравним исходные и скорректированные значения во второй строке матрицы $S(11, 11)$, которые показаны в табл. 2. Становится очевидным, что практически со всеми скорректированными значениями можно согласиться, по-видимому, даже включая значе-

Таблица 1 Характеристики матрицы $S(11, 11)$ после коррекции при разных α

α	Cond	D	$\lambda_{\max}$	$\lambda_{\min}$
0,01	1652,78	0,032	3,6348	0,002199
0,10	162	0,058	3,633299	0,022427
0,14	116	0,070	3,632479	0,031307
0,30	65,26	0,128	3,627854	0,055590

Таблица 2 Значения элементов второй строки в матрице $S(11, 11)$

Исходное	0,562	1	0,784	0,057	0,196	0,218	0,009	−0,017	−0,002	0,163	0,284
$\alpha = 0{,}10$	0,552	1	0,759	0,065	0,213	0,191	0,030	−0,006	0,009	0,169	0,254
$\alpha = 0{,}14$	0,549	1	0,752	0,067	0,216	0,187	0,033	−0,003	0,011	0,169	0,248
$\alpha = 0{,}30$	0,534	1	0,715	0,076	0,228	0,169	0,046	0,013	0,023	0,167	0,219

ния, где меняется знак. Конечно, здесь нужна более строгая (статистическая) проверка значимости отклонений скорректированных значений от исходных.

Ввиду того что в общем случае с некоторыми корректировками исследователь может и не согласиться, рассмотрим также возможность корректировки не всех элементов в строке матрицы парных сравнения для объекта, внесшего метрическое нарушение. Будем считать, например, что поочередно один из элементов второй строки не корректируется.

На рис. 2 представлены графики изменения характеристик матрицы $S(11, 11)$ при изменении доли α. Сразу следует отметить, что корректировка неполной строкой приводит к невозможности изменения доли α во всем диапазоне $0 < \alpha < 1$, так как предельное скорректированное значение минора $S_{11} = S_{10}$ при $\alpha = 1$ не удается получить из-за ненулевой скорректированной строки.

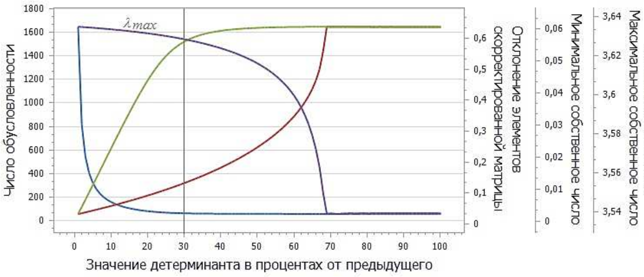
Таким образом, при изменении доли α возникает порог, когда система уравнений (4) оказывается несовместной (табл. 3). Также можно убедиться, что достигнутые значения числа обусловленности сопоставимы со значением числа обусловленности при корректировке полным вектором. Это показывает, что действительно корректировать в матрице парных сравнений можно меньшее число элементов.

Анализ табл. 3 показывает, что во многих случаях когда неизменяемый элемент оказывается почти нулевым, то это фактически соответствует случаю корректировки полной строкой, позволяя просмотреть весь интервал $0 < \alpha < 1$ изменения доли корректируемого детерминанта S_{11} относительно предыдущего значения S_{10} (элементы s_{24}, s_{27}, s_{28} и s_{29}).

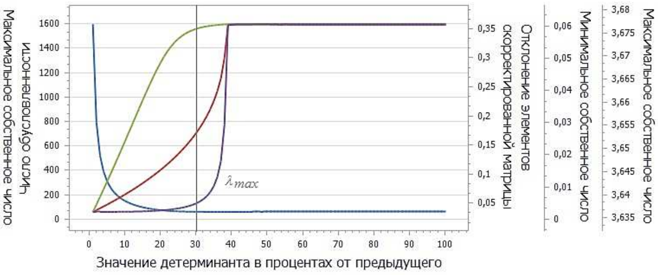
Небольшое значение неизменяемого элемента, но не позволяющее считать его нулевым, также определяет почти весь интервал изменения доли α (элементы s_{25}, s_{26}, $s_{2,10}$ и $s_{2,11}$).

Наконец, большое по модулю значение неизменяемого элемента значительно сокращает интервал изменения доли α (s_{21} и s_{23}). Можно показать, что увеличение числа неизменяемых элементов, если их значения сильно отличаются от нулевых, радикально сужает интервал изменения доли α. В этом случае может оказаться, что при ограниченном числе корректируемых элементов мы не сможем обеспечить требуемый уровень коррекции, задаваемый параметром α. В частности, такая ситуация обычно наблюдается при попытке коррекции одиночным элементом.

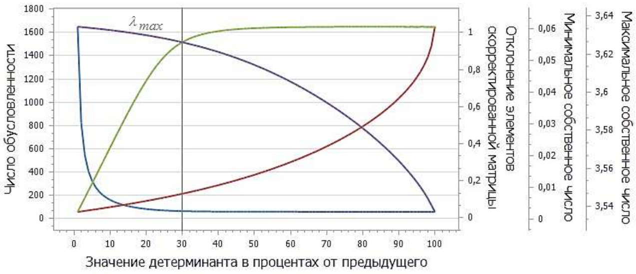
В общем случае, чем меньше число корректируемых элементов, тем сильнее их отклонения от исходных значений.



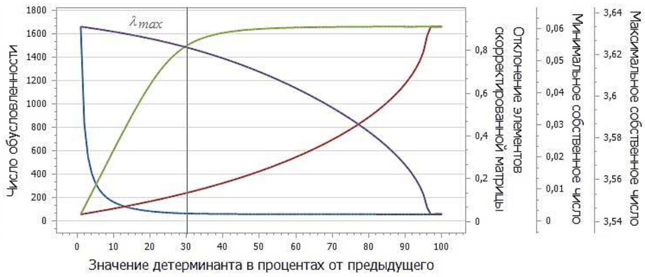
(*а*) $s_{21} = 0{,}562$, порог $\alpha = 0{,}7$



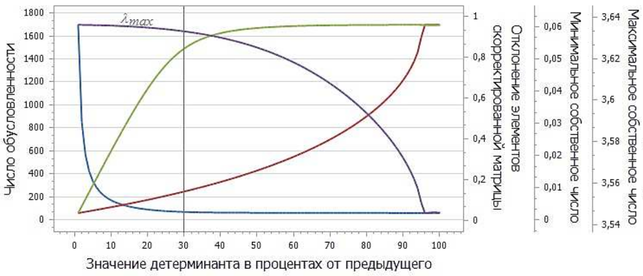
(*б*) $s_{23} = 0{,}784$, порог $\alpha = 0{,}39$



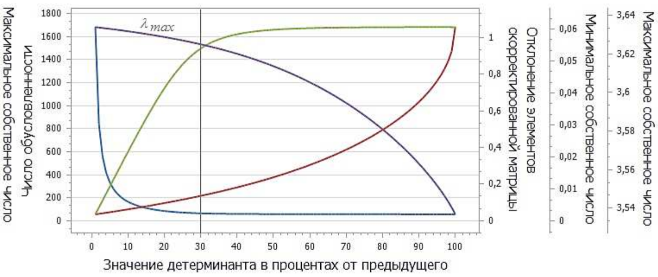
(*в*) $s_{24} = 0{,}057$, порог $\alpha = 1$



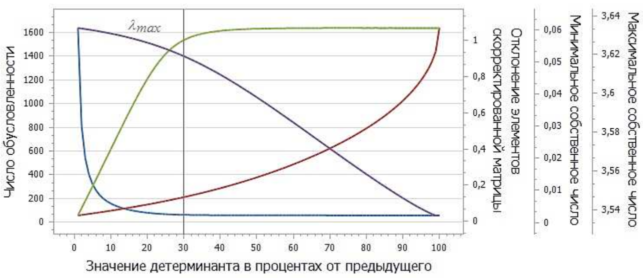
(*г*) $s_{25} = 0{,}196$, порог $\alpha = 0{,}97$



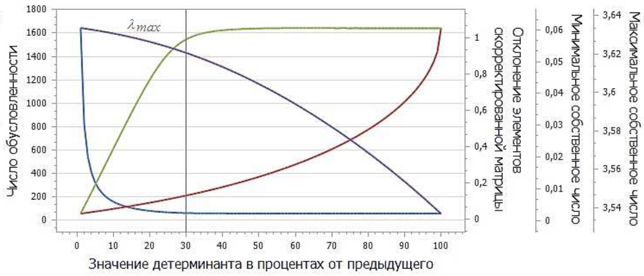
(*д*) $s_{26} = 0{,}218$, порог $\alpha = 0{,}96$



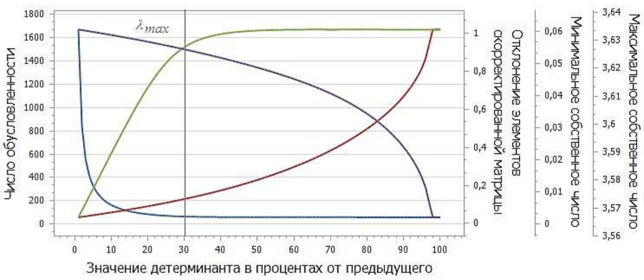
(*е*) $s_{27} = 0{,}009$, порог $\alpha = 1$



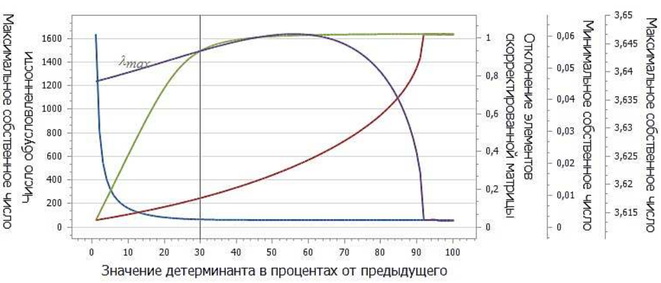
(*ж*) $s_{28} = -0{,}017$, порог $\alpha = 1$



(*з*) $s_{29} = -0{,}002$, порог $\alpha = 1$



(*и*) $s_{2,10} = 0{,}163$, порог $\alpha = 0{,}98$



(*к*) $s_{2,11} = 0{,}284$, порог $\alpha = 0{,}92$

Рис. 2 Изменение характеристик матрицы $S(11, 11)$ при изменении доли $0 < \alpha < 1$ (в процентах)

Таблица 3 Характеристики матрицы $S(11,11)$ после коррекции при $\alpha = 0{,}3$ неполным вектором

Элемент	Cond	D	$\lambda_{\max}$	$\lambda_{\min}$	Порог α
$s_{21} = 0{,}562$	64,869381	0,132	3,6286	0,055937	0,70
$s_{23} = 0{,}784$	61,5059	0,170	3,638119	0,059151	0,39
$s_{24} = 0{,}057$	65,05	0,130	3,626335	0,055747	1
$s_{25} = 0{,}196$	66,289948	0,133	3,623685	0,054664	0,97
$s_{26} = 0{,}218$	68,308514	0,142	3,633191	0,053188	0,96
$s_{27} = 0{,}009$	67,19	0,136	3,624918	0,053947	1
$s_{28} = -0{,}017$	63,66	0,134	3,61919	0,056852	1
$s_{29} = -0{,}002$	63,470246	0,132	3,620596	0,057044	1
$s_{2,10} = 0{,}163$	65,78159	0,128	3,626781	0,055134	0,98
$s_{2,11} = 0{,}284$	65,87692	0,154	3,643714	0,055311	0,92

5 Заключение

В работе рассмотрен алгоритм оптимальной коррекции неположительно определенных матриц парных близостей. Алгоритм позволяет определить, какие элементы множества вносят метрические искажения и скорректировать их парные сравнения. Предложенный алгоритм позволяет регулировать степень коррекции парных сравнений элемента множества, опираясь на заранее заданный параметр коррекции.

В работе показано, что естественное требование минимизации отклонений скорректированных значений от исходных с неизбежностью приводит к (почти) нулевому детерминанту скорректированного минора, что недопустимо, так как соответствующая нормированная матрица близостей элементов множества оказывается плохо определенной с (почти) бесконечным числом обусловленности.

В работе поставлена и решена задача поиска оптимальной коррекции, позволяющей получить приемлемое значение числа обусловленности скорректированной матрицы. К сожалению, оказалось, что параметр задачи оптимизации связан с числом обусловленности лишь неявно, что пока не позволило сформулировать на данном этапе исследований математически корректную задачу поиска оптимального числа обусловленности.

Тем не менее, в работе предложен эмпирический способ определения диапазона подходящих значений числа обусловленности. В совокупности с ранее полученными результатами [1–6] определены рекомендации для применения практической технологии метрической коррекции произвольных матриц парных сравнений.

Литература

[1] *Двоенко С. Д., Пшеничный Д. О.* Устранение метрических нарушений в матрицах парных сравнений // Изв. ТулГУ. Технические науки, 2013. № 2. С. 96–104.

[2] *Двоенко С. Д., Пшеничный Д. О.* О локализации отрицательных собственных значений в матрицах парных сравнений // Изв. ТулГУ. Технические науки, 2013. № 9. Вып. 2. С. 94–102.

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

[4] *Dvoenko S. D.* Clustering and separating of a set of members in terms of mutual distances and similarities // Trans. Machine Learning Data Mining, 2009. Vol. 2. No. 2. P. 80–99.

[5] *Двоенко С. Д.* Двухкомпонентная функция качества кластеризации множества элементов, представленных парными сравнениями // Машинное обучение и анализ данных, 2014. Т. 1. № 9. С. 1141–1153.

[6] *Двоенко С. Д., Пшеничный Д. О.* Оптимальная коррекция метрических нарушений в матрицах парных сравнений // Машинное обучение и анализ данных, 2014. Т. 1. № 7. С. 885–890.

[7] *Демидович Б. П., Марон И. А.* Основы вычислительной математики. — М.: Наука, 1966. 664 с.

[8] *Небылицын В. Д.* Избранные психологические труды. — М.: Педагогика, 1990. 408 с.

Поступила в редакцию 29.08.2017

The conditionality of matrices of pairwise comparisons after metric corrections*

S. D. Dvoenko and D. O. Pshenichny

sergedv@yandex.ru; denispshenichny@yandex.ru

Tula State University, 92 Lenina pr., Tula, Russia

In modern intelligent data analysis and data mining, results of investigations are usually represented by mutual pairwise comparisons of similarity or dissimilarity of objects. It needs to immerse results of pairwise comparisons into some metric space for correct using of machine learning algorithms. One of the conditions of the correct immersion is the nonnegative definite matrix of pairwise similarities of set elements. In this case, nonnegative similarities represent scalar products of vectors in the positive quadrant of an imaginary feature space and corresponding dissimilarities represent distances. Various similarity and dissimilarity measurements are used in practice. Nevertheless, not all of them are correct as metric functions. Therefore, it needs to use metric corrections of real experimental matrices of pairwise comparisons to reach the positive definiteness of the corresponding matrices of standard scalar products. Unfortunately, the natural best limit to minimize deviations of corrected values from initial ones leads to ill-conditioned matrices of scalar products with the large condition number. A way to improve the conditionality of matrices of pairwise comparisons is investigated.

Background: Experimental data are usually represented by mutual pairwise comparisons of similarity or dissimilarity of objects. If data are immersed into some metric space, the nonnegative definite matrix of pairwise similarities of set elements represents data. The problem consists in various similarity and dissimilarity measurements used in practice. However, not all of them are correct as metric functions and give nonpositive definite matrix of pairwise similarities. Therefore, measurement results need to be corrected.

Methods: The novelty of the proposed method consists in detecting objects, which contribute violations in metrics. Pairwise comparisons of such objects with others are optimally corrected to provide the minimal deviation of new values from the initial ones. In contrast to traditional approach based on the Karhunen–Loeve decomposition, the proposed method allows to correct only some of the matrix elements. From other side, the proposed method allows to reach a suitable value of a condition number of a resulted matrix.

Results: The proposed method appears to be the basis of the improved technique for metric corrections of any experimental matrix of pairwise comparisons. Experimental results on real data show the significant reducing of condition numbers of the corrected matrices.

Concluding Remarks: In contrast to traditional approaches, the proposed method is able to optimally correct only some elements of a matrix of pairwise comparisons and provide the optimal and not so big condition number.

Keywords: *metrics; determinant; eigenvalue; eigenvector; scalar product; pairwise comparisons*

DOI: 10.21469/22233792.3.1.04

*The research was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 17-07-00319).

References

[1] Dvoenko, S. D., and D. O. Pshenichny. 2013. Ustranenie metricheskikh narusheniy v matritsakh parnykh sravneniy [The removing of metric violations in matrixes of pair comparisons]. *Izv. TulGU. Tekhnicheskie nauki* [Proceedings of Tula State University. Technical sciences] 2:96–104.

[2] Dvoenko, S. D., and D. O. Pshenichny. 2013. O lokalizatsii otritsatel'nykh sobstvennykh znacheniy v matritsakh parnukh sravnrniy [On localization of the negative eiegnvalues for matrices of pairwise comparisons]. *Izv. TulGU. Tekhnicheskie nauki* [Proceedings of Tula State University. Technical sciences] 9(2):94–102.

[3] Dvoenko, S. D., and D. O. Pshenichny. 2013. O metricheskoy korrektsii matrits parnykh sravneniy [On metric correction of matrices of pairwise comparisons]. *Machine Learning Data Anal.* 1(5):606–620.

[4] Dvoenko, S. D. 2009. Clustering and separating of a set of members in terms of mutual distances and similarities *Trans. Machine Learning Data Mining* 2(2):80–99.

[5] Dvoenko, S. D. 2014. Dvukhkomponentnaya funktsiya kachestva klasterizatsii mnozhestva elementov, predstavlennykh parnymi sravneniyami [Bi-partrial objective function for clustering a set elements in terms of pairwise comparisons]. *Machine Learning Data Anal.* 1(9):1141–1153.

[6] Dvoenko, S. D., and D. O. Pshenichny. 2014. Optimal'naya korretsiya metricheskikh narusheniy v matritsakh parnykh sravneniy [Optimal correction of metrical violations in matrices of pairwise comparisons]. *Machine Learning Data Anal.* 1(7):885–890.

[7] Hamming, R. W. 1962. *Numerical methods for scientists and engineers*. McGraw-Hill. 411 p.

[8] Nebylitsyn, V. D. 1990. *Izbrannye psihologicheskie trudy* [Selected psychological proceedings]. Moscow: Pedagogika. 408 p.

Received August 29, 2017