Опубликована: Сб. тр. X Науч.-техн. Всерос. Научн. Конф. “Нейроинформатика-2008” 24-28 января 2008г. Москва. Изд. М.: - МИФИ, 2008, Ч.1, с.219-230.

А.Ю. Дорогов, М.Ю. Шестопалов

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

dorogov@lens.spb.ru

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ОДНОРОДНЫХ ОБЛАСТЕЙ ПРИЗНАКОВОГО ПРОСТРАНТСТВА ДЛЯ ЗАДАЧИ НЕЙРОСЕТЕВОЙ КЛАССИФИКАЦИИ ОБРАЗОВ

Структура признакового пространства представляется графом статистических связей. Неоднородность в области данных трактуется как наличие противоречий в клипированном варианте графа связей. Для выделения однородных областей предлагается использовать методы локальной балансировки знаковых графов.

1. Введение

Нейронные сети прямого распространения хорошо решают задачу классификации, когда обучающая выборка соответствует однотипному поведению объекта, а кластеры образуют компактные области в признаковом пространстве. Проблемы классификации образов в неоднородном признаковом пространстве породили идею использования коллективных классификаторов [1]. Наиболее трудным этапом в этом подходе является задача выделения областей компетенции для частных классификаторов. Под областью компетенции понимается подмножество объектов признакового пространства, в пределах которого определена сфера действия частного классификатора с заданным подмножеством распознаваемых образов. Главная проблема заключается в отсутствии достоверного критерия однородности для признакового поля области компетенции.

При анализе данных обычно исследуются статистические зависимости между переменными признакового пространства. Типичные решения, основанные на корреляционных мерах, позволяют построить граф связей, где степень взаимной зависимости между признаками выражается коэффициентом парной корреляции. Для целей анализа числовые значения клипируются до уровня +1 или -1. В результате получаем знаковый граф связей. В данной работе показано, что однородность областей признакового пространства можно трактовать как наличие баланса в локальности знакового графа.

Эмпирические данные обычно представлены в таблице «объект-свойство» и охватывают совокупность единичных объектов, рассматриваемых как независимые наблюдения сложной системы. Объекту наблюдения соответствует одна строка таблицы с набором признаков доступных для измерения. Данные могут состоять из подмножеств объектов характеризующих качественно различные поведения системы. Статистический подход убирает эти различия для парных связей, но трансформирует их на структурный уровень, где они проявляются в тернарных и n-арных отношениях между признаками. Задача состоит в том чтобы, используя структурную информацию определить подмножества признаков, являющихся носителями области с однородным поведением (локальности), выделить типичные состояния системы в границах локальности и верифицировать эти состояния в таблице данных. Полученные подмножества объектов наблюдения будут определять область компетенции для частного классификатора.

В настоящей работе рассматривается только задача структурной локализации однородных областей. Для решения этой задачи предлагается использовать клипированный вариант графа связей, где степень связи характеризуется значением либо +1 либо -1 (или 0, если связь отсутствует). Такие графы впервые были использованы как модели для исследования социологических систем [2]. В моделях на основе знакового графа задача обычно сводится к выявлению нарушений знакового баланса и поиску метода их устранения. Принципиально новый подход к решению данной проблемы представлен в работах Б.Ф. Фомина и Т.Л. Качановой (1978) которые использовали модель знакового графа для реконструктивного анализа сложных систем [3,4]. Основная идея парадигмы заключается в оптимальном использовании внутренних симметрий знакового графа для балансировки его локальностей. Основные положения новой парадигмы будут использованы в данной работе.

2.Треугольник противоречий и композиции контуров

Минимальный знаковый граф, позволяющий выразить противоречие, представляет собой замкнутый контур, состоящий из трех вершин (рис. 1а)). В данном графе при передаче по контуру $x_1 - x_2 - x_3 - x_1$ положительное приращение переменной x_1 трансформируется в отрицательное приращение этой же переменной, т.е. контурный коэффициент передачи имеет значение (-1), что физически трактуется как противоречие. В этом случае контур называют несбалансированным или нечетным. В общем случае знаковый граф называется несбалансированным, если он содержит хотя бы один несбалансированный контур. Нарушенный баланс в знаковом графе отражает наличие неоднородного поведения объекта, которое трансформируется из системы данных на уровень структурного представления.

Особая роль фигуры треугольника заключается в том, что он может служить базой индукции в задаче балансировки сложных знаковых гра-

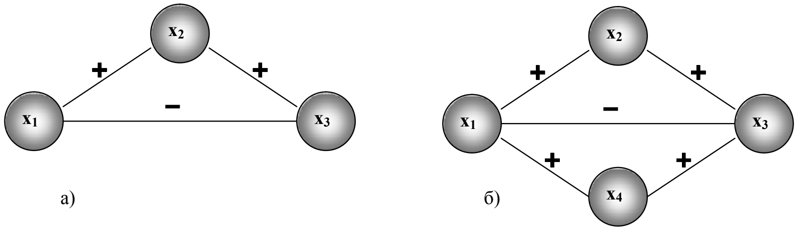

Рис. 1. а) Треугольник противоречий. б) Декомпозиция согласованного контура в два несогласованных треугольника

фов. Нетрудно показать, что многовершинный контур, образованный сторонами смежных треугольников, будет сбалансирован, если сбалансированы все образующие его треугольники. Обратное, вообще говоря, не верно, альтернативный пример показан на рис. 1б).

Утверждения для композиций из треугольников легко обобщаются на композиции произвольных контуров. Контурной композицией знакового графа назовем любое подмножество непересекающихся контуров, транзитивно связанных между собой общими ребрами. Контурная композиция называется *планарной*, если ее можно разложить на плоскости без пересечения ребер образующих контуров. Внешние границы планарной композиции образуют единственный объемлющий контур.

Теорема «О балансе планарной контурной композиции». Знак объемлющего контура планарной композиции равен произведению знаков образующих контуров.

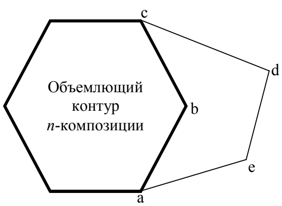

Рис. 2. Расширение контурной композиции

Доказательство. Докажем данное положение по индукции. Базой индукции является композиция из двух контуров. Непосредственной проверкой можно убедиться, что объемлющий контур согласован, только когда два образующих контура композиции имеют одинаковые знаки.

Предположим, что теорема верна для композиции из n контуров, покажем, что она верна для композиции из $n+1$ контура. Композиция из $n+1$ контуров может быть получена из n-композиции, если замкнуть контуром любой непрерывный участок границы объемлющего контура (см рис. 2). Объемлющий контур n-композиции и дополнительный контур теперь можно рассматривать как композицию из двух контуров, для которых теорема верна. *Теорема доказана.*

3. Разделяющие структуры

Определяющей позицией новой парадигмы балансировки является концепция последовательной индукции от минимальной цикловой фигуры – треугольника противоречий. Каждый треугольник противоречий обладает симметрией поворота, что не дает возможность точно установить несогласованные пары связей и все варианты согласования являются допустимыми. Была высказана идея, что нарушить симметрию поворота треугольника можно за счет информации имеющейся в его ближайшем окружении. Окружение для треугольника противоречий должно быть таким, чтобы подграф каждой вершины окружения включал в себя треугольник противоречий как единое целое. Это условие приводит к многовершинной структуре – тетраэдру (рис. 3) в которой сам треугольник противоречий (α) служит основанием тетраэдра, а вершина окружения (f) связана симметричными связями со всеми вершинами треугольника.

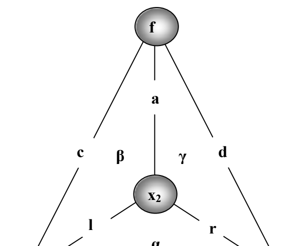

Рис. 3. Многовершинная структура. Знаки ребер обозначены латинскими символами, контурные передачи – греческими символами

Каждый тетраэдр многовершинной структуры имеет три боковых грани и к ним также применим критерий знакового баланса. Отправной точкой для последующих рассмотрений является следующая теорема.

Теорема «О разделении граней тетраэдра». Если в основании тетраэдра помещен несбалансированный треугольник, то возможны только две альтернативы: либо в тетраэдре нет согласованных граней, либо две из четырех граней тетраэдра согласованы. Невозможными являются случаи, когда согласованны три грани или только одна ка-

кая-то грань.

Доказательство. По условию грань $x_1 - x_2 - x_3$ есть треугольник противоречий (см. рис. 3), поэтому $\alpha = lrb = -1$. Предположим, что треугольник $x_1 - f - x_3$ согласован, тогда его контурная передача определяется равенством $\xi = cdb = 1$. Выразим это равенство, через передачи контуров. По теореме «о контурной композиции» имеем:

$$cdb = \beta\gamma\alpha = 1.$$

Поскольку $\alpha = -1$, то последнее равенство будет выполняться, когда β и γ будут иметь разные знаки. Таким образом, при данном предположении только две из четырех граней тетраэдра могут быть согласованы.

Предположим теперь, что $cdb = \beta\gamma\alpha = -1$ и $\alpha = -1$. Равенство будет выполняться, только если β и γ имеет одинаковые знаки. Когда эти знаки положительны, то две грани в тетраэдре согласованы, когда знаки отрицательны, то в тетраэдре нет согласованных граней. Случаи, когда согласованы три или одна грань тетраэдра (с треугольником противоречий в основании) существовать не могут. *Теорема доказана.*

Для полноты картины рассматриваются все возможные тетраэдры имеющими в основании заданный треугольник противоречий. С каждой вершиной окружения связаны три грани, по доказанной теореме две из этих граней могут быть согласованы. Число возможных сочетаний согласованных пар равно трем. Поэтому все вершины окружения могут быть разделены на три категории. В каждую категорию группируются вершины окружения с общими согласованными парами граней.

Если одна из трех категорий является пустым множеством, то многовершинная структура приобретает осевую симметрию. При такой симметрии элементы треугольника становятся различимыми, в нем выделяются особое ребро – база и противоположное этому ребру вершина – особая вершина (рис. 4). База основания играет особую роль и отличается по своей значимости от боковых ребер; все треугольники, образованные вершинами окружения и замкнутые на базу не противоречивы, напротив все противоречивые треугольники замкнуты на боковые ребра. В силу этого изменение знаков боковых ребер при согласовании будут мотивированы принципом минимальных изменений, тогда как перемена знака базы никак не обоснована. Таким образом, в многовершинной структуре остаются только два обоснованных варианта согласования, порождаемых изменением знака какого либо одного бокового ребра (рис. 5).

Если из трех категорий вершин окружения две являются пустыми, то многовершинная структура ассиметрична. Для нее существует единственный вариант согласования, связанный с изменением только одной стороны треугольника основания, а именно той с которой вершины окружения образуют противоречивый треугольник. Выбор базы из двух остав-

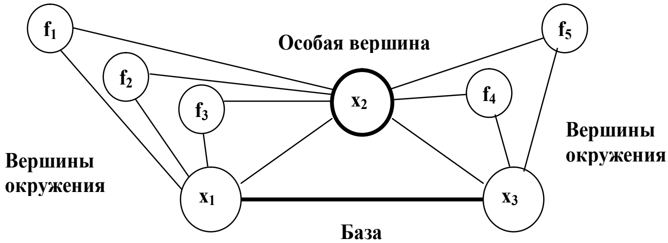

Рис. 4. Морфология многовершинной структуры (для упрощения рисунка часть ребер не показана)

шихся сторон не определен, но это не препятствует использованию ассиметричных структур в процедурах балансировки наравне со структурами, обладающими осевой симметрией. Более того, эти структуры наилучшим образом отвечают принципу минимальных изменений.

Многовершинные структуры обоих типов состоящие из N тетраэдров окружения удовлетворяют следующим условиям:

1. Количество согласованных треугольников в структуре равно $2N$, тогда как число не согласованных треугольников в ней, включая основание равно $(N+1)$.
2. Только одно ребро основания (база) определяет с вершинами окружения N согласованных треугольников.
3. Сумма согласованных треугольников, образованных вершинами окружения и двумя другими ребрами основания структуры равна N.

Три перечисленных условия полностью соответствуют теореме «о разделении граней тетраэдра» в предположении, что в каждом тетраэдре многовершинной структуры существуют сбалансированные треугольники. Многовершинные структуры, удовлетворяющие данным трем условиям, были названы *разделяющими* и обозначаются далее идентификатором «SHARE». Разделяющие структуры с осевой симметрией называются также *синглетами* [4].

Осевая симметрия SHARE разделяет вершины окружения на два непересекающихся подмножества – фактора. Каждый из факторов образует согласованные треугольники с одним из боковых ребер основания, и треугольники противоречий с другим боковым ребром. Более того, считает-

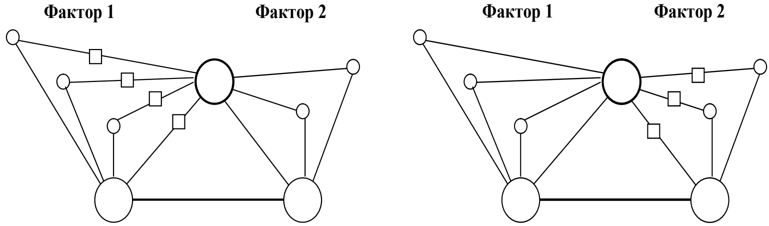

Рис. 5. Варианты согласования многовершинной структуры. Прямоугольниками помечены связи одновременно изменяемые при согласовании

ся, что вершины баз включаются в факторы, это позволяет рассматривать симметричные и ассиметричные разделяющие структуры в одном ключе. Допустимое согласование достигается изменением знаков связей вершин одного из факторов с особой вершиной.

4. Алгебраическая интерпретация противоречий

Каждое ребро знакового графа отражает взаимную зависимость двух системных переменных $x_i \leftrightarrow x_j$. Эта связь является двусторонней для внутренних переменных и односторонней для внешних воздействий. Рис. 6 демонстрирует знаковый граф, в котором явным образом выражена на-

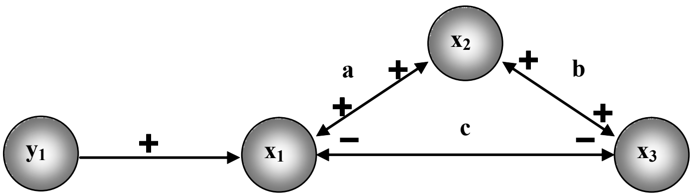

Рис. 6. Полная модель знакового треугольника

правленность и симметричность связей. Вершины x_1, x_2, x_3 соответствуют внутренним переменным, а вершина y_1 - внешнему воздействию. Эквивалентным описанием знакового графа является матрица связей (матрица смежности). Для графа показанного на рис. 6 эта матрица имеет вид:

$$C = \begin{array}{c|ccc} & x_1 & x_2 & x_3 \\ \hline x_1 & 0 & 1 & -1 \\ x_2 & 1 & 0 & 1 \\ x_3 & -1 & 1 & 0 \end{array}$$

Элементы матрицы связей равны коэффициентам передачи между системными переменными. Матрица симметрична по отношению к главной диагонали, поскольку симметричны все внутренние связи. По графу можно построить также систему алгебраических уравнений, определяющих реакцию системы на внешние воздействия:

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + x_3 = y_1 \\ -x_1 + x_2 - x_3 = 0 \\ x_1 - x_2 + x_3 = 0. \end{cases}$$

Матрица системы для нашего примера имеет вид:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Системная матрица связана с матрицей связей соотношением: $A = I - C$, где I - единичная матрица. Системные переменные и внешние воздействия представим в виде векторов:

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \qquad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Тогда реакция системы на внешние воздействия может быть выражена в виде матричного уравнения: $AX = Y$. Уравнение имеет единственное решение относительно вектора X, если определитель Δ_A системной матрицы A отличен от нуля. Нетрудно проверить, что для треугольника противоречий значение определителя равно нулю (причем в данном случае любой минор второго порядка также равен нулю). При нулевом определителе возможны две альтернативы: либо существует множество решений, которые образуют плоскость в пространстве состояний системы, либо не существует ни одного, если система не совместна. Это свидетельствует о неопределенности реакции системы на внешние воздействия при нулевом определителе. Причем несовместность в данном случае является типичным состоянием ввиду произвольности внешних воздействий. Противоречия в графе связей возникают, когда система данных объединяет неоднородные области, порожденные различными стереотипами поведения одного и того же объекта.

Нейросетевые классификаторы реализуют только однозначные отображения и поэтому плохо моделируют поведение системы с реакцией, которая соответствует или близка к неопределенной. Это обстоятельство является обоснованием необходимости использования однородных областей признакового пространства для построения областей компетенции нейросетевых классификаторов.

Говорят, что алгебраическая система плохо обусловлена [5], если определитель ее системной матрицы близок или равен нулю. Таким образом, наличие противоречий в треугольнике эквивалентно плохой обусловленности соответствующей алгебраической системы. В целом это положение справедливо и для более сложных знаковых графов с противоречиями, хотя определитель их системной матрицы может быть отличен от нуля. Абсолютное значение определителя служит мерой обусловленности системы

На ряде примеров покажем влияние противоречий в знаковом графе на степень обусловленности системной матрицы. Рассмотрим полносвязанный граф. В таком графе связи существуют между любой парой вершин. Тривиален вариант, когда в полносвязанном графе все связи отрицательны. Очевидно, что тривиальный граф, противоречив, поскольку в нем любой треугольник не сбалансирован. Системная матрица тривиального графа состоит из положительных единиц и ее определитель равен нулю в силу очевидной линейной зависимости между столбцами.

Более тонкое влияние наличий противоречий в графе на степень обусловленности системной матрицы позволяет отразить следующая теорема.

Теорема 1. Если в полносвязанном знаковом графе существуют, по крайней мере, две вершины связанные отрицательными связями со всеми остальными вершинами графа, то граф несбалансирован и определитель системной матрицы данного графа равен нулю.

Доказательство. Несбалансированность знакового графа, следует из того, что две указанные вершины между собой связаны отрицательной связью и в полносвязанном графе всегда существует третья вершина, с которой две данных вершины также связаны отрицательными связями. В результате имеем, по крайней мере, один треугольник противоречий с тремя отрицательными связями.

Перенумерацией вершин системную матрицу можно привести к виду, в котором первые два столбца соответствуют связям для указанной пары вершин, например в графе из 4-х вершин системная матрица будет иметь вид:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & * & * \\ 1 & 1 & * & * \\ 1 & 1 & * & * \\ 1 & 1 & * & * \end{bmatrix},$$

где символом «*» отмечены ненулевые значения +1 или -1. В данной матрице два столбца линейно зависимы, поэтому ее определитель равен нулю. *Теорема доказана.*

Теорема справедлива и для неполносвязанного графа, если в нем можно указать третью вершину, с которой связаны обе выделенные вершины. Следующая теорема специфична для полносвязанного графа, и определяет более слабые достаточные условия противоречивости графа, и плохой обусловленности системной матрицы.

Теорема 2. Если в полносвязанном знаковом графе отрицательные связи образуют полносвязанный подграф, то исходный граф несбалансирован и определитель его системной матрицы равен нулю.

Доказательство. Для случая, когда полносвязанный подграф с отрицательными связями состоит из трех и более вершин, наличие противоречий следует из теоремы 1. В случае если в подграфе только две вершины и, следовательно, существует только одна отрицательная связь, то эта связь образует со всеми остальными вершинами графа противоречивые треугольники и поэтому исходный граф несбалансирован.

Перенумерацией вершин графа блок матрицы, соответствующий подграфу с отрицательными связями можно разместить в левом верхнем углу общей системной матрицы. Например, для графа из шести вершин и трех вершин подграфа с отрицательными связями системная матрица будет иметь вид:

$$
\left[\begin{array}{ccc|ccc}
1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\
1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\
1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\
\hline
-1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\
-1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\
-1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1
\end{array}\right].
$$

По теореме Лапласа [6] определитель системной матрицы может быть выражен через сумму произведений всех миноров k-го порядка (в данном примере k=3) образуемых в первых k строках на их алгебраические дополнения. Нетрудно видеть, что все столбцы в первых трех строках попарно линейно зависимы, поэтому любой минор будет равен нулю и, следовательно, определитель системной матрицы также равен нулю. *Теорема доказана.*

Комбинируя теоремы 1 и 2 для полносвязанного графа можно сформулировать следующую теорему.

Теорема 3. Если в полносвязанном знаковом графе отрицательные связи образуют связанный подграф, в котором существуют, по крайней мере, две вершины, связанные отрицательными связями со всеми другими вершинами подграфа, то исходный граф несбалансирован и определитель его системной матрицы равен нулю.

5. Заключение

В работе дано математическое обоснование необходимости использования однородных фрагментов признакового пространства в качестве областей компетенции нейросетевых классификаторов.

Показано, что проблема выделения однородных областей может быть разрешена методами индуктивного системного анализа данных. Базой анализа является знаковый граф связей, представляющий собой клипированный вариант графа корреляционных связей. В работе представлен только первый шаг индукции, связанный с выделением разделяющих структур. Концепция взаимодействия разделяющих структур [7] позволяет продолжить индуктивный путь наращивания локальностей. Использование знакового графа связей, вместо исходного корреляционного обеспечивает условие робастности при выделении однородных областей, что создает дополнительные гарантии их однородности.

Список литературы

1. Растригин Л.А., Эренштейн Р.Х. Метод коллективного распознавания. - М.: Энергоиздат, 1981.- 80с. (Б-ка по автоматике; Вып. 615).
2. Cartwright, Dorwin, and Harary, F. (1956). Structural balance: A generalization of Heider’s theory. Psychological Review 63: 277-292.
3. Качанова Т.Л., Фомин Б.Ф. Метатехнология системных реконструкций: СПб: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2002.- 336с.
4. Качанова Т.Л., Фомин Б.Ф. Технология системных реконструкций.- СПб.: Политехника, 2003.- 146с. – (Проблемы инновационного развития. Вып.2).
5. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения).- М.: Наука, 1975.- 631с.
6. Матрицы и вычисления. Воеводин В.В., Кузнецов А.Ю.- М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1984.-320с.
7. Дорогов А.Ю. Математические основы методов оптимально частичной балансировки знаковых графов.- Деп. в ВИНИТИ 23.07.2007, №760-В2007, 33с.