等价闭包矩阵及其算法

闫德勤[1] 迟忠先[2]

(辽宁师范大学计算机系 大连116029)[1] (大连理工大学计算机系 大连116026)[2]

Equivalence Closure Matrix and its Algorithm

YAN De-Qin[1] CHI Zhong-Xian[2]

(Department of Computer, Liaoning Normal University, Dalian 116029)[1]

(Department of computer, Dalian University of Technology, Dalian 116026)[2]

Abstract Properties of fuzzy equivalence matrix is studied, and the theorem about equivalence matrix is developed, with the theorem the mistake proof in a new algorithm for computing the fuzzy equivalence closure of a fuzzy similarity matrix is corrected.

Keywords Fuzzy clustering, Fuzzy equivalence matrix, Equivalence closure matrix

1 引言

在模糊聚类分析的研究与应用中，基于模糊关系等价闭包的模糊聚类算法，又称等价闭包法是一种重要的方法。等价闭包法即是利用样本间的模糊相似关系矩阵进行模糊矩阵相乘得到模糊等价矩阵进而得到等价闭包矩阵，选取适当的阈值对闭包矩阵截取得到一定的分类。该算法的关键问题就是计算出等价闭包矩阵。设 R 为模糊相似矩阵，其等价闭包矩阵由下式计算：

$$R^{*}=R\cup R^{2}\cup\cdots\cup R^{n-1} \qquad (1)$$

计算(1)式的复杂度为 $O(n^5)$[6]。当样本数较大时，等价闭包矩阵的计算非常费时。因此(1)式的加速算法受到关注[2~7]。

最近，Lee[6]提出了一种计算模糊相似矩阵等价闭包的优化算法。该算法对模糊相似矩阵的最大元素排队，利用求桥元素的方法得出等价闭包矩阵，其复杂度为 $O(n^2)$。这一结果是令人鼓舞的，但在文[6]中证明该算法一定产生等价闭包矩阵的过程存在着难以通过的错误环节。本文对等价闭包矩阵的算法以及等价矩阵的性质进行了研究，给出了相关定理，依据本文给出的定理给出了一种文[6]中算法的一种证明。

2 基本概念与定理

定义1 一个 $n\times n$ 的模糊矩阵 $A=(a_{ij})$，若有 $a_{ii}=1(1\leqslant i\leqslant n)$则称为自反的，若 $a_{ij}=a_{ji}$则称为对称的。自反对称的模糊矩阵称为模糊相似矩阵。

定义2 若 $a_{ij}\geqslant\vee_k(a_{ik}\wedge a_{kj})$则称矩阵 $A=(a_{ij})$为传递的。

定义3 一个传递的相似的模糊矩阵称为模糊等价矩阵。

定义4 若对所有的 i,j 都有 $a_{ij}\leqslant b_{ij}$，则称矩阵 B 包含矩阵 A，记作 $A\subseteq B$。

定义5 若模糊等价矩阵 B 包含模糊相似矩阵 A，且被所有包含矩阵 A 的模糊等价矩阵所包含，则称 B 为 A 的等价闭包。

由定义可知相似矩阵的等价闭包即是等价闭包。一个矩阵的等价闭包即是包含该矩阵的最小模糊等价矩阵。

定理1 设 A 为模糊等价矩阵，P 为初等变换矩阵，则 $B=PAP^{T}$ 仍为模糊等价矩阵。更进一步地有若 P 为初等变换矩阵之积，则 B 仍为模糊等价矩阵。

证明：首先矩阵 B 是对称的。在初等变换矩阵的作用下

闫德勤 博士，副教授，主要研究领域为模式识别、图像处理等。迟忠先 教授，博士生导师，主要研究领域为知识发现、数据仓库、数据挖掘等。

结论 最小二乘支持向量机采用最小二乘线性系统代替传统的支持向量机采用二次规划方法解决模式识别和函数估计，本文给出了用于模式识别和函数估计的最小二乘支持向量机详细推理和算法。从最小二乘支持向量机对典型样本的学习和模式识别结果看，采用最小二乘支持向量机进行模式识别，运算简单，收敛速度快，精度高。

参考文献

1 Vapnik V N. The nature of statistical learning theory. Springer-Verlag, New-York, 1995

2 Vapnik V N. Statistical Learning Theory. John Wiley, New York, 1998

3 Suykens J A K, Vandewalle J, De Moor B. Optimal Control by Least Squares Support Vector Machines. Neural Networks, 2001, 14(1): 23~35

4 Zhu Jia-Yuan, Ren Bo, Zhang Heng-Xi, Deng Zhen-Ting. Time Series Prediction via New Support Vector Machines. IEEE. In: proc. of ICMLC'2002. China, Beijing. 364~366

5 Zhu Jia-Yuan, Zhang Heng-Xi, Guo Ji-Lian, Feng Jing-Lei. Data Distributions Automatic Identification Based on SOM and Support Vector Machines. IEEE. In: proc. of ICMLC'2002, China, Beijing. 340~344

6 张恒喜，郭基联，朱家元，虞建飞著. 小样本多元数据分析方法及应用. 西北工业大学出版社，2002

7 朱家元，张恒喜. 基于支持向量机的R&D项目中止决策研究. 计算机科学，2002，29(9)

8 朱家元，段宝君，张恒喜. 新型SVM对时间序列预测研究. 计算机科学，2003，7

矩阵 A 中的元素最终相当于做了行列的对称变换，其结果是对行列而言 i 变为 t，j 变为 s。因为 A 是模糊等价矩阵，所以由定义，对所有的 i,j 有 $a_{ij} \geqslant \vee_k (a_{ik} \wedge a_{kj})$ 成立。当然对 t,s 也成立：$a_{ts} \geqslant \vee_k (a_{tk} \wedge a_{ks})$。又由于 t,s 是变换后的行列标号，即矩阵 B 中的标号，因此对矩阵 B 而言等价关系成立。因任选定矩阵 B 中的行列 t,s 都有矩阵 A 中的 i,j 对应从而等价关系成立，所以由定义 B 是等价矩阵。

定理2[7]　设 A 为模糊等价矩阵，则对任何 a_{ij}, a_{ik}, a_{kj} 或者全相等，或者其中有两个相等第三个大。

定理3　设 A 为模糊等价矩阵，若其 i 行(列)中最大元素在 j 列上，如为 a_{ij}，则 i 行(列)与 j 行(列)中除最大元素所对应的元素以及与对角元相对应的元素外，其它相对应的元素都相同。

证明　以行为例，设 a_{ij} 为 i 行中最大元素，对于由于 A 为模糊等价矩阵，因此有 $a_{ij} \geqslant \min(a_{ik} \wedge a_{jk})$。由定理2，这三个元素中最多只能有一个大的，其它二元必相等。若 a_{ij} 是这三个中最大的则结论成立。由于 a_{ij} 与 a_{ik} 在同一行，另外一种情况只能是 a_{ij} 最大，这意味着 $a_{ij}=a_{ik}$。即对应不同元素的元素为本行的最大元，从而结论成立。

在定理3中由于 A 为模糊等价矩阵，因此最大元 $a_{ij}=a_{ji}$ 既存在于 i 行(列)也存在于 j 行(列)。因此定理3的另一种叙述可为：设 A 为模糊等价矩阵，其中任一行(列)与该行最大元素对称元所在行(列)除最大元素所对应的元素以及与对角元相对应的元素外，其它相对应的元素都相同。

3　等价闭包的优化算法

文[6]中提出了桥元素的概念，把模糊等价矩阵用等价对角块子阵与桥元素块子阵表示给出了一种优化等价闭包矩阵的算法。该算法把计算等价闭包矩阵的复杂度降到了一个很低的水平。

设 $C=(c_{ij})$ 为 $n_1 \times n_1$ 矩阵，$D=(d_{ij})$ 为 $n_2 \times n_2$ 矩阵。$\wedge(C)$ 表示矩阵 C 中元素的最小值。矩阵 C 和 D 的桥记作 $E(t;C,D)$，其结构如为：

$$E(t;C,D)=\begin{pmatrix} C & (t)_{n_1 \times n_2} \\ (t)_{n_2 \times n_1} & D \end{pmatrix}$$

其中，$t \leqslant \wedge(\wedge(C), \wedge(D))$。

定理2[6]　如果 C 和 D 为模糊等价矩阵，则任给 $t \leqslant (0, \wedge(\wedge(C), \wedge(D)))$ 桥矩阵 $E(t;C,D)$ 也是模糊等价矩阵。

由模糊相似 $n \times n$ 矩阵 A 计算模糊等价矩阵 A^* 的算法[6]为(OA)：

Step 1. 清空 A^* 的所有元素

Step 2. 降序选出 A 上三角阵的所有元素

Step 3. 取 $a_{ii}^* = 1$ $(1 \leqslant i \leqslant n)$

Step 4. $k=1$

Step 5. 1. While A^* 存在未定元 do

设 $a_{i_1 j_1}$ 为由 Step 2列出的第 k 个元素，如果 $a_{i_1 j_1}^*$ 为空元，则 $a_{i_1 j_1}$ 视为桥元素。取

$I=\{j \mid a_{i_1 j}^* \neq 0\}$，$I^*=\{i \mid a_{i j_1}^* \neq 0\}$

令 $a_{ij}^* = a_{ji}^* = a_{i_1 j_1}$　$(i \in I \ and \ j \in I^*)$

Step 5. 2. $k=k+1$

在证明该算法得出的一定是等价闭包矩阵时，文[6](133页)中的一关键式

$$b'_{i_0 j_0} \geqslant \min(b'_{i_0 j_1}, b'_{i_1 j_1}, b'_{j_1 j_0}) \geqslant b'_{i_1 j_1}$$

没有根据，且一般情况下不成立。因此文[6]证明路线难以通过。根据定理3我们在下一节中给出该结论正确性的证明。

4　OA 算法的证明

以下我们给出文[6]算法(OA)所得出的一定是等价闭包矩阵的证明。

证明：设 $A^*=(a_{ij}^*)$ 为由算法 OA 产生的等价矩阵，$B=(b_{ij})$ 为模糊相似矩阵 A 的等价闭包矩阵。则 $B \supseteq A$，对任给 i，j 有 $b_{ij} \geqslant a_{ij}$。

用反证法。设 A^* 不是 A 的等价闭包矩阵。则必存在下标 t,k 使得

$$a_{tk} \leqslant b_{tk} < a_{tk}^* \tag{2}$$

成立。下面对 t,k 处的元素分两种情况讨论。

第一种情况是 a_{tk} 为桥元素中的最大元。此时，由算法 OA 知 $a_{tk}=a_{tk}^*$。与(2)式矛盾。

第二种情况是 a_{tk} 不为桥元素中的最大元。设 i,j 处为 a_{tk}^* 所在桥元素块中的最大元，则 $a_{tk} < a_{tk}^* = a_{ij}^*$。由于 B 为 A 的等价闭包，在 i,j 处必有 $a_{ij}^* = a_{ij} \leqslant b_{ij}$。又因 $A^* \supseteq A$，B 为 A 的等价闭包，所以有 $a_{ij}^* \geqslant b_{ij}$，从而得到 $a_{ij}^* = b_{ij}$。当 $a_{ij}=a_{ij}^*$ 为矩阵 A 的最大元素时，由 OA 算法知若 t,k 与 i,j 不为同一位置则 a_{tk}^* 不会成为 a_{ij}^* 桥元素块中的一员。即 $a_{ij}=a_{ij}^*$ 所在的行(列)中必有比 $a_{ij}=a_{ij}^*$ 更大的元，因此可以推出 b_{ij} 所在的行(列)中必有比 b_{ij} 更大的元，假设 i 行最大元为 b_{is}。由矩阵的对称性 b_{si} 也是 s 行中最大元。由定理3知 $b_{sj}=b_{ij}$。同理，根据 b_{ij} 所在 j 列中最大元可找到其它与 b_{ij} 相同的元素。

这样的找法所找到的正是 b_{ij} 的桥元素块。因此其下标一定包含 t,k，即 $b_{tk}=b_{ij}$。所以有 $b_{tk}=a_{ij}=a_{ij}^*$。又由于 $a_{tk}^*=a_{ij}^*$，得到 $b_{tk}=a_{tk}^*$。与(2)式矛盾。

结论　本文对等价矩阵进行了研究，给出了相关的定理，为研究闭包矩阵及其算法提供了基础。值得指出的是应用本文中的定理也可证明文[5]中求等价闭包矩阵算法中所求元素一定是闭包元素。

参 考 文 献

1　Zadeh L A. Fuzzy sets. Inform. and Control, 1965, 8: 338～353

2　Dunn J C. A gragh-theoretic analysis of pattern classification via Tamura's fuzzy relation. IEEE Trans. System Man Cybernet, 1974, 4:310～313

3　Dunn J C. Some recent investigations of a new fuzzy partitioning algorithm and its application to pattern classification problems. J. Cybernet, 1974, 4:1～15

4　Kandel A, Yelowitz L. Fuzzy chains. IEEE Trans. System Man Cybernet, 1974, 4: 472～475

5　Fu Guoyao. An algorithm for computing the transitive closure of a fuzzy similarity matrix. Fuzzy Sets and Systems, 1992, 51: 189～194

6　Lee H S. An optimal algorithm for computing the max-min transitive closure of a fuzzy similarity matrix, 2001, 123: 129～136

7　Potoczny H B. On similarity relations in fuzzy relational databases. Fuzzy Sets and Systems, 1984, 12: 231～235