МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
В ИНФОРМАТИКЕ
(Вычислительные системы)

2002 год Выпуск 169

УДК 519.68

ЛОГИЧЕСКАЯ СПЕЦИФИКАЦИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Е.В. Михиенко

Введение

В 1943 году в работе Мак–Каллока и Питтса появилось понятие нейронной сети. В своей работе они показывают, что сеть, состоящая из элементов особого вида, которые они назвали нейронами, способна решать тот же класс задач, что и машины Тьюринга. Но исторически сложилось, что развитие вычислительной техники пошло по пути предложенном Дж. фон Нейманом, который кстати, в качестве базовых моделей элементов ЭВМ предложил использовать модифицированную форму нейронов Мак–Каллока и Питтса. В 60–х годах к нейросетевой архитектуре вновь возник большой интерес со стороны многочисленных исследователей. Это было связано с появлением работ Френка Розенблатта [1,2], который разработал первое обучаемое нейросетевое устройство для распознавания образов — персептрон. Но в 1969 году вышла книга Минского и Пейперта "Персептрон" [3], в которой доказанно, что персептроны могут решать лишь весьма ограниченный круг задач. Это послужило причиной охлаждения интереса к тематике нейросетей. В 80–е годы возник новый бум нейронных сетей. Причиной послужили работы Хопфильда и Румельхарта [1,2], в которых были предложены новые модели и методы обучения, позволившие преодолеть ограничения, связанные с персептроном. В наше время нейронные сети используются для решения задач искусственного интеллекта: распознавание образов, оптимизация, прогнозирование, управление, классификация. Эксперименты показывают, что нейронные сети показывают очень высокий результат по сравнению с более традиционными методами. К данному моменту, хорошо развит математический аппарат нейронных сетей и накоплено много информации по использованию сетей в различных областях знаний. Таким образом, мы имеем дело с областью, продемонстрировавшей свою работоспособность, но в то же время имеющей много открытых вопросов и ограничений.

Перечислим основные проблемы в использовании нейронных сетей.

1. Отсутствует базис нейронных сетей, т.е. построение и обучение сети хотя и описывается математическими терминами и формулами, но имеет четко выраженный эмпирический характер. Не существует четкого алгоритма для построения структуры нейронной сети, решающей ту или иную задачу, построение идет путем многочисленных экспериментов.

2. Нельзя гарантировать, что полученная сеть будет оптимальной.

3. Нейронная сеть на данный момент представляет собой "черный ящик", результаты которого не допускают интерпретации в системе понятий предметной области.

4. При всех своих достоинствах, нейронные сети в современном представлении, не позволяют познавать предметную область и служить инструментом исследования, т.е. существует проблема извлечения знаний из сети.

Фактически все основные проблемы связаны с вопросами надежности и понимания результата полученного нейронной сетью. Действительно, мало получить некоторый результат, но требуется понять как этот результат получен сетью и насколько он надежен. Пока не будет возможности интерпретировать результаты нейронных сетей нельзя говорить об их постоянном использовании в области медицины, финансов и т.д., где ошибки влекут за собой тяжелые последствия. Более того, в любой области при практическом использовании, новые методы обязательно проходят через экспертный контроль и поэтому от возможности интерпретации сети зависит возможность их практического использования. Дальнейший прогресс в использовании нейронных сетей, возможен когда каким-либо образом будут решены эти проблемы. Одним из возможных вариантов решения проблемы будет указание метода, который позволит получить представление нейронной сети в виде позволяющем провести необходимый анализ и получить оценки результата полученного сетью. Построение такого метода является одним из вопросов, разобранных в настоящей работе.

Фактически речь идет о построении формальной спецификации нейронной сети. Для того чтобы построить спецификацию, нужно задать язык или формальную систему в которой ставиться и решается [12] задача. В работах [16,17] показано, что формальные системы для постановки и решения задач должны быть слабыми. В частности такой системой является логическое программирование. Следовательно, допустим метод, который описывает нейронную сеть на языке логических программ. Такое представление не только удобно для анализа, но и допускает удобное сравнение с другими методами получения новых знаний.

В настоящее время, только в работах J. Shavlik's [4–6] представлен достаточно строгий метод получения правил из нейронной сети. Это метод, описанный в данной работе, основан на алгоритмах KBANN и MofN. Алгоритм KBANN позволяет строить нейронную сеть для исследования проблемной области, используя при этом уже имеющиеся знания об этой области. Алгоритм MofN используется для извлечения из нейронной сети правил определенного вида, доступных для анализа. При совместном использовании, эти алгоритмы позволяют, используя нейросетевые методы, на основе уже имеющихся знаний получать новые знания проблемной области, и таким образом, пополнять базу знаний. Подход, предложенный J. Shavlik's показал высокие результаты при решении задачи расшифровки генной последовательности.

Такой подход является не единственным методом машинного обучения для получения новых знаний из данных. Другой метод, который рассмотрен в этой работе — семантический вероятностный вывод, построенный Е.Е. Витяевым на основе теории семантического программирования, разработанной в 1985 году Ю.Л. Ершовым, С.С. Гончаровым и Д.И. Свириденко [18]. Идея семантического программирования состоит в том, чтобы процесс вычисления рассматривать как проверку истинности утверждения на некоторой модели. Более того, можно рассматривать более разнообразные взаимоотношения высказываний и модели, рассматривая процесс вычисления как определение вероятности или статистической значимости. Причина разработки семантического вероятностного вывода заключается в том, что в существующих методах получения новых знаний используется аксиоматический подход, который не позволяет получать адекватные оценки достоверности полученных знаний. Суть в том, что при аксиоматическом подходе, оценки решений не влияют на процесс вывода, и в следствии этого могут в ходе логического вывода значительно уменьшаться. В итоге решение имеет неопределенную степень достоверности и непонятно в каком смысле являются решениями. Семантический вероятностный вывод позволяет в данных находить факты, из которых решение следует с максимальным значением оценки условной вероятности. Процесс вероятностного вывода не требует правил вывода и устроен так, что вполне определяется увеличением вероятностной оценки. Процесс вычисления, представим в виде дерева,в вершине которого находится интересующая нас цель $A \leftarrow$, а в узлах находятся правила, полученные добавлением атома или конъюнкции атомов в посылку. Выбор добавляемого атома определяется требованием увеличения условной вероятности. В результате мы получаем квазитождество, в посылке которого стоит конъюнкция из атомов, принадлежащих множеству данных рассматриваемой проблемной области. Условная вероятность результирующего квазитождества больше чем у любого другого квазитождества, в посылке которого стоят атомы, принадлежащие тому же множеству данных, а в следствии цель А. Оценки вероятностей и условных вероятностей, вычисляются по правилам вероятностной логики. Созданная на основе семантического вероятностного вывода программная система GeneDiscovery позволила получить новые закономерности в последовательности ДНК и помогла проанализировать последовательности эретроицид — специфичных промоторов и промоторов генов эндокринной системы. Более подробно с этими результатами можно ознакомиться в работах [15, 16].

Данная работа представляет собой решение следующих задач.

1. Проанализировать правила MofN, предложенные J. Shavlik's, и на основе анализа построить логическую спецификацию нейронных сетей.

2. Из нейронной сети и правил MofN извлечь вывод и представить работу нейронной сети как логический вывод.

3. Получить логическую спецификацию нейронной сети в виде квазимногообразия.

4. Проанализировать полученную спецификацию нейронной сети с точки зрения семантического вероятностного вывода.

§ 1. Обобщение дискретного и нейросетевого подходов для получения новых знаний

Допустим, что мы имеем набор дискретных правил, описывающих некоторую проблемную область. Мы хотим обобщить дискретный и нейросетевой подход к получению новых знаний предметной области. Вообще, разницу в этих подходах можно описать следующим образом: дискретный подход основан на создании дискретных комбинаций имеющихся данных, а нейросетевой подход, на регулировании непрерывного нелинейного оценивания вкладов этих данных.

Имеется достаточно большое количество способов объединения этих подходов. Например Utgoff [8] разработал алгоритм, который обобщает решающие деревья и персептрон Розенблатта.

Однако мы сосредоточимся на структуре, представленной на рис. 1.

Эта структура содержит 3 стадии:

а) построение по символьной информации нейронной сети;

б) обучение нейронной сети стандартными методами на имеющихся примерах;

в) Извлечение символьной информации из нейронной сети.

Мы подробнее рассмотрим первую и третью стадию представленной структуры. Вопросы связанные со второй стадией хорошо описаны в литературе по нейронным сетям. Стоит заметить что в работах Towell & Shavlik (1989), Mitchell & Thrun (1993) [4], Hinton (1989) [7], Fu (1989) [9,10], Mahoney & Mooney (1993) [4], предложены некоторые дополнения и модификации к построению сети и обучающему алгоритму.

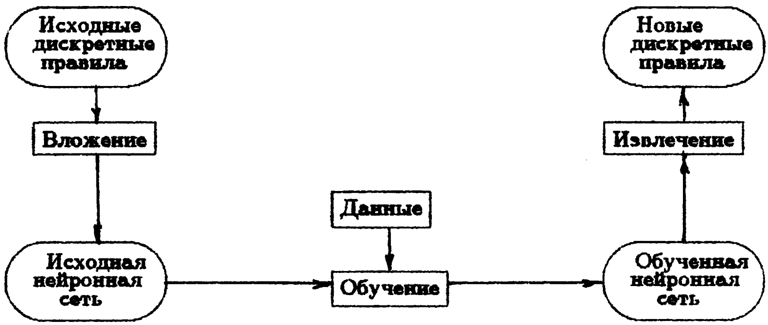

Рис. 1

1. Построение сети по символьной информации. Предложенный Towell, Savlik и Noordewier [6] алгоритм KBANN позволяет создавать нейронные сети, топология которых соответствует структуре зависимостей исходных дискретных правил. Такие сети мы будем называть интеллектуальными нейронными сетями. На рис. 2 показан простейший пример использования KBANN алгоритма.

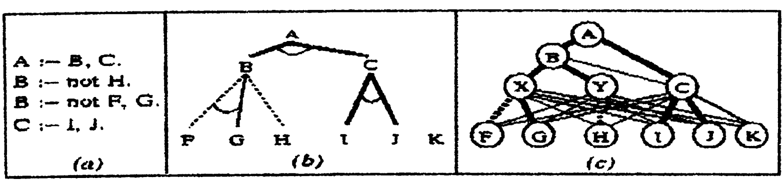

Рис. 2

Нейроны X и Y подставлены в сеть для создания дизъюнкций правил. Таким образом, каждый нейрон сети представляет собой следствие или атом посылки исходных правил. Добавление новых связей позволяет находить новые соотношения на области знаний. Начальные веса и смещения в сети подбираются таким образом, что до обучения выход сети соответствует результату полученному из исходных правил.

Алгоритм успешно применялся для решения реальных задач в таких областях как расшифровка последовательности гена, свертка белка, задачи управления. Различные исследования показали, что интеллектуальная нейронная сеть обучается быстрее чем стандартная нейронная сеть и к тому же ошибка предсказания в первой меньше чем у стандартной нейронной сети. Рис. 3 представляет график точности работы интеллектуальных и стандартных нейронных сетей (ИНС и НС на рисунке соответственно) как функцию числа примеров используемых в обучении.

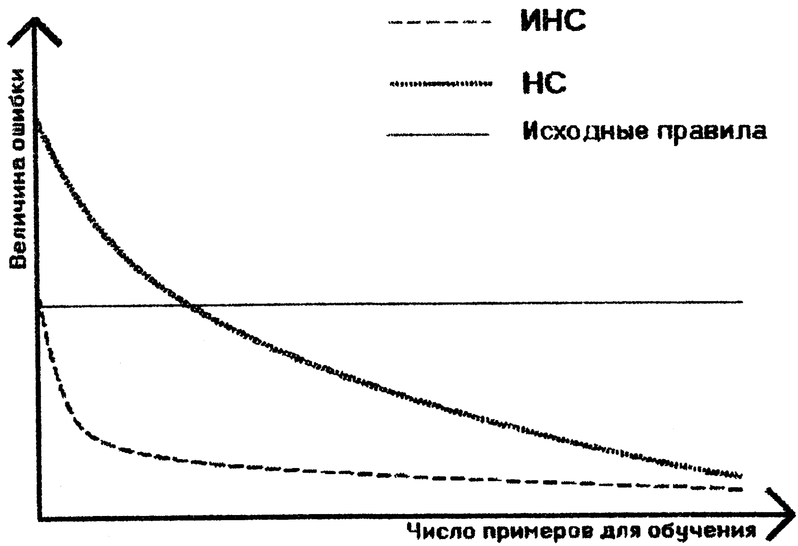

Рис. 3

Можно заметить, что ассимптотически точности двух сетей сходятся на тех экспериментальных данных, где было достаточно большое число примеров для обучения. Но во многих областях знаний невозможно представить большое количество примеров и таким образом использование интеллектуальных нейронных сетей в этих случаях заведомо предпочтительнее.

Towell [5] в своих работах показал, что алгоритм KBANN позволяет лучше представить область знаний, чем это делают различные дискретные системы.

2. Извлечение правил из обученной сети. Алгоритм "MofN". Третья стадия структуры, изображенной на рис. 1, состоит в извлечении дискретной информации из обученной нейронной сети. Вообще извлечение правил — одна из наиболее важных задач, связанная с теорией нейронных сетей. Необходимо чтобы нейронная сеть перестала представлять собой "черный ящик" и позволяла получать логически прозрачный результат.

Над методами извлечения правил из нейронных сетей работали многие ученые. Можно сослаться на работы Gallant (1988), Saito и Nakano (1988) [4], Fu (1991) [9,10]. Чаще всего рассматривались методы, которые на основе пороговых ограничений преобразовывали сеть в набор правил.

Towell и Shavlik [4,6] разработали метод, который позволяет для каждого нейрона скрытого и выходного слоя получить правило вида "Если M из N, следовательно, верно". Они показали, что предложенный алгоритм позволяет извлекать постижимые правила и при этом сохраняет точность обученной сети. Однако их подход хорошо работает только на интеллектуальных нейронных сетях. Метод, предложенный Nowlan и Hinton [7], улучшает работу MofN-алгоритма на стандартных сетях. Рис. 4 демонстрирует работу алгоритма извлечения MofN–правил. MofN–алгоритм извлекает правила из обученной интеллектуальной нейронной сети в предположении, что нейроны сети принимают значения близкие к 1 — активный нейрон, или к 0 — неактивный нейрон. Это условие легко достигается увеличение кривизны сигмоидной функции активации.

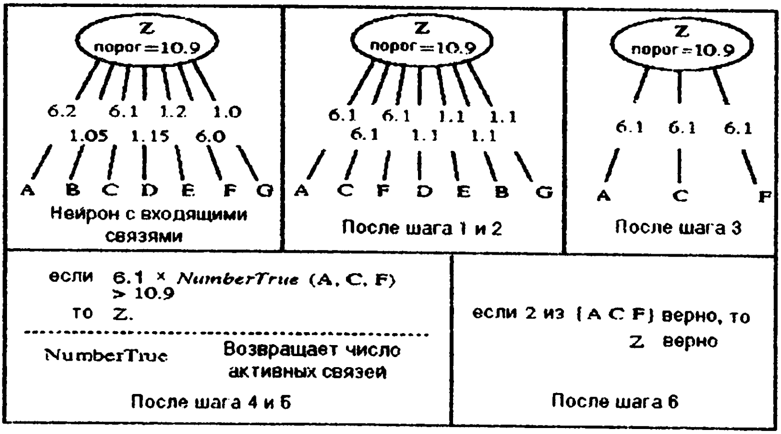

Рис. 4

Алгоритм состоит из следующих шагов.

Шаг1. Для каждого нейрона скрытого и выходного слоя производится кластеризация входящих связей на основе значений весов. Используются стандартные алгоритмы кластеризации.

Шаг 2. В каждом полученном кластере значения весов заменяются на среднее значение весов кластера.

Шаг 3. Анализ каждого кластера на соответствие. В примере, изображенном на рис.4, кластер у которого среднее значение веса равно 1.1, может быть отвергнут потому, что активация нейрона Z никогда не будет произведена с использованием нейронов B, D, E, G.

Шаг 4. Формирование правила для каждого нейрона скрытого и выходного слоя.

§ 2. Логические программы и спецификация нейронной сети

1. Элементы логического программирования

Зафиксируем язык первого порядка L конечной сигнатуры $\Omega =< \{P_i\}_{i\in I}, \{C_k\}_{k\in K} >$, где P_i — символ для предиката, C_k — символ для константы.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ[1]. Логической программой Pr будем называть набор предложений языка L.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ[1]. Правилом называется формула вида $A_1\&\ldots\&A_n \to A_0$, где все A_i — атомарные формулы вида $P(\bar{x})$, $P(\bar{c}), P(\bar{x},\bar{c})$; $\bar{x} \in X$ – множество переменных, а $\bar{c} \in \{C_k\}$ — множество констант.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ[1]. Запросом называется формула вида $A_1\&\ldots\&A_n \to$, где A_i — атомарные формулы.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ[1]. Фактом называется формула вида $\to A_0$, где A_0 — атомарная формула.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ[1]. Подстановкой называется отображение $\theta : X \to X$, где X — множество переменных.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ[1]. Унификатором выражений B_1 и B_2 называется подстановка θ такая, что $B_1\theta = B_2\theta$.

Вообще у двух выражений может быть бесконечно много унификаторов, но среди них всегда имеется наиболее общий унификатор σ такой, что все остальные унификаторы получаются в результате действия на σ некоторых подстановок.

Зафиксируем некоторое правило вычисления R, которое в каждом запросе выделяет некоторый атом. Рассмотрим запрос $N =\leftarrow A_1\&\ldots\&A_n$, в котором правилом R выделен атом A_i, и некоторое правило программы Pr: $B_1\&\ldots\&B_k \to B$, у которого все переменные отличны от переменных запроса. Пусть θ — наиболее общий унификатор атомов B и A_i. Тогда запросы

$$\leftarrow (A_1\&\ldots\&B_1\&\ldots\&B_k\&\ldots\&A_n)\theta, \text{ если } k \geq 1;$$

$$\leftarrow (A_1\&\ldots\&A_i\&\ldots\&A_n)\theta, \text{ если } k = 0$$

будем называть выводимыми из запроса N по правилу $B_1\&\ldots$ $\ldots\&B_k \to B$ с помощью подстановки θ и правила вычисления

[1]См. литературу [11–12].

R. Заметим, что при унификации атома A_i с некоторым фактом $B \leftarrow$ программы Pr, атом не удаляется как это принято в стандартном прологовском выводе. Такие атомы будут выделяться жирным шрифтом. Будем предполагать, что правило вычисления R на очередном шаге не выберет выделенный атом.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Назовем последовательность запросов N_0, $N_1, N_2 \ldots$, правил $C_0, C_1 \ldots$ и унификаций $\theta_0, \theta_1 \ldots$, такую что $N = N_0$, SLDF–выводом запроса N; запрос N_{i+1} выводим из запроса N_i по правилу C_i с помощью подстановки θ_i и правила вычисления R.

SLDF–вывод, заканчивающийся запросом, в котором все атомы выделены, называется успешным. Конечный SLDF–вывод, не являющийся успешным, — тупиковым. Множество SLDF–выводов, начинающихся с запроса N, можно представить в виде дерева. SLDF–дерево, содержащее успешный SLDF–вывод, называется успешным.

2. Квазитождества. Вероятность. Эрбранова модель.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ [13,14]. Формула вида $A_1 \& \ldots \& A_n \to A_0$, где все A_i — атомарные формулы сигнатуры Ω, называется квазитождеством.

Таким образом, логическая программа Pr является набором квазитождеств сигнатуры Ω

Покажем, что любое MofN–правило представляется некоторым набором квазитождеств. Общий вид правила MofN: (если m из $\{A_1, \ldots, A_n\}$ верно, то A_0). Рассмотрим некоторую нейронную сеть и множество {MofN} квазитождеств, ее описывающих. Обозначим через A_j^i атом, являющийся j–нейроном слоя i, тогда MofN–правило примет вид (если m из $\{A_{j_1}^i, \ldots A_{j_n}^i\}$ верно, то A_j^{i+1}). Набор квазитождеств, соответствующий этому правилу, состоит из C_n^m–формул, в посылке которых стоит конъюнкция различных k атомов из множества $\{A_{j_1}^i, \ldots A_{j_n}^i\}$. Обозначим через $\{A_{j_m}^i\}$ конъюнкцию атомов, являющуюся посылкой квазитождества. Таким образом, квазитождества, представляющее MofN–правило, имеют вид $\{A_{j_m}^i\} \to A_j^{i+1}$. Нейроны первого слоя представлены фактами $A_j^1 \leftarrow$.

ПРИМЕР. Правило (если 2 из $\{A_1^2, A_2^2, A_3^2\}$ верно, то A_1^3) представляется следующим набором из $C_3^2 = 3$ формул: $A_1^2 \& A_2^2 \to A_1^3$, $A_1^2 \& A_3^2 \to A_1^3$, $A_2^2 \& A_3^2 \to A_1^3$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ[2]. Класс $\Re$ моделей сигнатуры Ω называется квазимногообразием, если существует такая совокупность Σ квазитождеств сигнатуры Ω, что $\Re$ состоит из тех и только тех моделей, в которых истинны все формулы из Σ.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ[2]. Совокупность Σ называется определяющей совокупностью квазимногообразия. Квазимногообразие называется конечно определимым, если оно обладает конечной определяющей совокупностью.

Обозначим через { MofN } совокупность MofN–правил, описывающих некоторую нейронную сеть и представленных в виде квазитождеств сигнатуры Ω. Эта совокупность является образующей для некоторого квазимногообразия $\Re$ той же сигнатуры.

Определим вероятность μ на множестве предложений F сигнатуры Ω, замкнутом относительно логических операций $\&, \vee, \neg, \to$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ [19]. Вероятностью μ на множестве F называется отображение $\mu : F \to [0,1]$, удовлетворяющее следующим условиям:

1) если $\vdash \phi$, то $\mu(\phi) = 1$;

2) если $\vdash \neg\phi$, то $\mu(\phi) = 0$;

3) если $\vdash \neg(\phi \& \psi)$, то $\mu(\phi \vee \psi) = \mu(\phi) + \mu(\psi)$;

4) $\vdash \phi \equiv \psi$, то $\mu(\phi) = \mu(\psi)$;

5) если x — свободная переменная для $\phi(x)$, то $\mu(\exists x \phi(x)) = max\{\mu(\vee_{i=1}^{n} \phi(c_i))\}$;

6) если x — свободная переменная для $\phi(x)$, то $\mu(\forall x \phi(x)) = min\{\mu(\&_{i=1}^{n} \phi(c_i))\}$;

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Вероятностной Эрбрановой моделью сигнатуры Ω будем называть пару $\mathcal{M} = < \{C_k\}_{k \in K}, \mu >$, где μ — вероятность на F.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Эрбрановой моделью сигнатуры Ω будем называть модель $\mathcal{M} = < \{C_k\}_{k \in K}, I >$, где $I : F \to \{0,1\}$.

Для любого множества квазитождеств всегда существует наименьшая Эрбранова модель, которая вместе со всеми ей изо-

---

[2]См. литературу [14].

морфными моделями образует абстрактный класс Эрбрановых моделей.

Рассмотрим некоторый класс G Эрбрановых моделей и некоторую вероятность μ, заданную на множестве F. Определим для некоторого $\varphi \in F$ подмножество класса G: $G(\varphi) = \{M \mid M \in G, M \models \varphi\}$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Класс Эрбрановых моделей G будем называть согласованным с вероятностью μ на множестве формул F, если из $\mu(\varphi) = 0$ следует $G(\varphi) = \emptyset, \varphi \in F$.

Если класс Эрбрановых моделей G на множестве предложений F согласован с вероятностью μ, то G согласован с вероятностной Эрбрановой моделью $\mathcal{M} =< \{C_k\}_{k \in K}, \mu >$

Покажем, что множество {MofN} является логической программой, у которой SLDF–дерево содержит успешный вывод. Для этого нам нужно при фиксированном правиле вычислений R построить последовательность запросов, последний из которых в посылке содержит конъюнкцию фактов.

Опишем SLDF–вывод запроса $N = \leftarrow A^i_j$. Из правила $C_0 = \{A^{i-1}_{j_k}\} \to A^j_i$ и запроса N, получаем запрос $N_1 = \{A^{i-1}_{j_k}\} \to$. Из запроса N_1 последовательным применением правил $C_j = \{A^{i-2}_{j_k}\} \to A^{i-1}_j$, получаем запросы $N_2 \ldots N_j$. У запроса N_j в посылке стоит конъюнкция атомов $\{A^{i-2}_{m_k}\}$ представляющих нейроны $i-2$ слоя. Так индуктивно, заменяя в запросе по имеющимся правилам атомы посылки на конъюнкции атомов предыдущего слоя, мы дойдем до запроса, в котором будет стоять конъюнкция атомов первого слоя, и, таким образом, получим запрос, у которого все атомы выделены. Видно, что возможность получения успешного вывода обеспечена иерархической структурой нейронной сети и фиксацией множества подстановок, полученного при обучении сети .

ПРИМЕР. Рассмотрим простую трехслойную сеть представленную следующим набором MofN–правил:

$$\text{если 2 из } \{A^2_1,\ A^2_2\ A^2_3\} \text{ верно, то } A^3_1,$$

$$\text{если 2 из } \{A^1_1,\ A^1_2\ A^1_3\} \text{ верно, то } A^2_1,$$

$$\text{если 2 из } \{A_2^1,\ A_3^1\ A_4^1\} \text{ верно, то } A_2^2,$$

$$\text{если 2 из } \{A_3^1,\ A_4^1\ A_5^1\} \text{ верно, то } A_3^2.$$

Этому набору соответствует следующее множество квазитождеств:

$$A_1^2\&A_2^2 \to A_1^3;\ A_1^2\&A_3^2 \to A_1^3;\ A_2^2\&A_3^2 \to A_1^3,$$

$$A_1^1\&A_2^1 \to A_1^2;\ A_1^1\&A_3^1 \to A_1^2;\ A_2^1\&A_3^1 \to A_1^2,$$

$$A_2^1\&A_3^1 \to A_2^2;\ A_2^1\&A_4^1 \to A_2^2;\ A_3^1\&A_4^1 \to A_2^2,$$

$$A_3^1\&A_4^1 \to A_3^2;\ A_3^1\&A_5^1 \to A_3^2;\ A_4^1\&A_5^1 \to A_3^1,$$

$$\to A_1^1;\ \to A_2^1;\ \to A_3^1;\ \to A_4^1;\ \to A_5^1,.$$

Укажем последовательность запросов и правил определяющих успешный SLDF–вывод запроса $N = \leftarrow A_1^3$:

$$N_0 = \leftarrow A_1^3;\ \ C_0 = A_1^2\&A_2^2 \to A_1^3,$$

$$N_1 = \leftarrow A_1^2\&A_2^2;\ \ C_1 = A_1^1\&A_2^1 \to A_1^2,$$

$$N_2 = \leftarrow A_1^1\&A_2^1\&A_2^2;\ \ C_2 = A_2^1\&A_3^1 \to A_2^2,$$

$$N_3 = \leftarrow A_1^1\&A_2^1\&A_3^1.$$

В запросе N_3 все атомы являются фактами, следовательно, последовательность N_0, N_1, N_2, N_3 является успешным SLDF–выводом запроса N.

3. Оценки вероятностей и условных вероятностей. Рассмотрим успешный SLDF–вывод запроса N при фиксированном правиле вычислений R, представленный последовательностью запросов $N, N_1, \ldots, N_k$, правил $C_0, C_1, \ldots, C_{k-1}$, программы, Pr и унификаций $\theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_{k-1}$; $\theta_0, \theta_1, \ldots, \theta_{k-1} = \theta$.

Последовательность запросов $N\theta, N_1\theta, \ldots, N_k\theta$ также будет SLDF–выводом запроса $N\theta$ с помощью правил $C_0\theta, C_1\theta, C_{k-1}\theta$, тождественных подстановок и правила вычисления R. Будем предполагать, что $(N\theta, N_1\theta, \ldots, N_k\theta) \in F$.

Пусть факты $A \leftarrow$ представлены правилами $A \leftarrow true$. Тогда для фактов $C = A \leftarrow;\ A \in F$ вероятность $\mu(C) =$

$= \mu(A/true) = \mu(A)$. Обозначим через $\{\widetilde{N}_i\}$, $\{\widehat{N}_i\}$ соответственно конъюнкцию всех не выделенных и выделенных атомов запроса N_i.

Пусть запрос $N_i\theta = (\leftarrow A_1\&\ldots\&B^i\&\ldots\&A_n)\theta$ выводим из запроса $N\theta = (\leftarrow A_1\&\ldots\&A_i\&\ldots\&A_n)\theta$ по правилу $(A_i \leftarrow B^j)$, где $B^j = B_1^j\&\ldots\&B_k^j$. Нужно получить оценки вероятностей $\mu(\widetilde{N\theta})$ и $\mu(\widetilde{N\theta}/\widehat{N_k\theta})$ по SLDF–выводу в предположении, что вероятности $\mu(A_i\theta)$, $\mu(B^j\theta)$, $p_i = \mu(A_i\theta/\widetilde{B^i\theta})$ известны.

Для этого приведем две теоремы без доказательств (доказательства можно посмотреть в работе [15]).

ТЕОРЕМА 1. *Если* $\mu(B^i\theta) > 0$, $i = 0,1,\ldots,k-1$, *то* $\mu(\widetilde{N\theta}) \geq 1 - \sum\limits_{i=0}^{k-1}(1-p_i)\mu(B^i\theta)$.

ТЕОРЕМА 2. *Если* $\mu(B^j\theta) > 0$, $j = 0,1,\ldots,i-1$ *и* $\mu(\widehat{N}_k) > 0$, *то* $\mu(\widetilde{N\theta}/\widehat{N}_k) \geq 1 - \sum\limits_{j=1}^{i-1}(1-p_j)\dfrac{\mu(B^j\theta)}{\mu(\widehat{N}_k)}$.

Рассмотрим SLDF–дерево некоторого запроса N и определим вероятностные оценки $\nu(N)$, $\eta(N)$ следующим образом:

- если SLDF–дерево не успешно то оценки не определены;
- если SLDF–дерево успешно, то рассмотрим множество $\{SLDF_1,\ldots,SLDF_m\}$ всех успешных SLDF–выводов запросов $N\theta_1,\ldots,N\theta_m$. Положим $\nu(N) = max\{\nu_1,\ldots,\nu_m\}$, $\eta(N) = max\{\eta_1,\ldots,\eta_m\}$, где $\nu_1,\ldots,\nu_m$ — оценки равные правой части неравенств из теоремы 1, а $\eta_1,\ldots,\eta_m$ - оценки условных вероятностей запросов $N\theta_1,\ldots,N\theta_m$, полученные из теоремы 2.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Предсказанием запроса N будем называть такой SLDF–вывод запроса $N\theta$, на котором достигается оценка $\nu(N)$. Величину $\nu(N)$ будем называть оценкой предсказания запроса N. Если предсказание не определено, то оценка предсказания не определена.

Если ψ — формула со свободными переменными, то положим $\mu(\psi) = \min\limits_{\theta\in\Theta}\{\mu(\psi\theta)\}$, где Θ - множество всех подстановок.

Для правила $C = A \leftarrow B_1\&\ldots\&B_k$ определим условную вероятность следующим образом:

$$\mu(C) = \frac{\mu(A)}{\mu(B_1 \& \ldots \& B_k)},$$ если правило не содержит свободных переменных;

$$\mu(C) = \min_{\theta \in \Theta} \left\{ \frac{\mu(A\theta)}{\mu((B_1 \& \ldots \& B_k)\theta)} \right\},$$ если правило содержит свободные переменные.

Если для некоторой подстановки θ, $\mu((B_1 \& \ldots \& B_k)\theta) = 0$, то значение $\mu(C)$ не определено. Через Pr_0 обозначим множество вех правил сигнатуры Ω, для которых вероятность μ определена.

§ 3. Семантический вероятностный вывод [2]

1. Вероятностные закономерности. Из правила $C = A \leftarrow A_1 \& \ldots \& A_n$, мы можем получить подправила $\{A_{i_k}\} \to A$, где $\{A_{i_k}\} = A_{1_k} \& \ldots \& A_{n_k} \subset \{A_1 \& \ldots \& A_n\}$. Известно, что подправило логически сильнее, чем само правило и если подправило $\tilde{C}$ и само правило C классифицируют один и тот же набор примеров, то подправило предпочтительнее.

Если предметная область имеет вероятностный характер, то следует вместо значений истина/ложь, использовать вероятностные характеристики выражений, представляющих предметную область. Уместно в качестве такой характеристики использовать условную вероятность выражения.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Правило $C = A \leftarrow A_1 \& \ldots \& A_n$ называется вероятностной закономерностью, т.е. выражает вероятностную причинную зависимость между посылкой $A_1 \& \ldots \& A_n$ и заключением A, если для любого условия $\{A_{i_k}\} = A_{1_k} \& \ldots \& A_{n_k} \subset \{A_1 \& \ldots \& A_n\}$ условная вероятность $\mu(A/\{A_{i_k}\}) < \mu(A/A_1 \& \ldots \& A_n)$.

Концептуально, вероятностные закономерности пришли из философии науки. Эти правила отражают математически существенные особенности научных законов:

- высокий уровень обобщения,
- простоту,

---

[2] Определения и часть теорем этого раздела аналогичны доказанным в работе [15].

• максимальная опровержимость.

Другое определение вероятностной закономерности дадим в терминах обобщения.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Для правил $C = A \leftarrow A_1\&\ldots\&A_n$ и $\widehat{C} = \widehat{A} \leftarrow \widehat{A}_1\&\ldots\&\widehat{A}_k$, отношение " $\gg$ " — быть более общим ($\widehat{C} \gg C$), имеет место тогда и только тогда, когда существует подстановка θ такая, что $\widehat{A}\theta = A, \{\widehat{A}_1\theta, \ldots, \widehat{A}_k\theta\} \subset \{A_1, \ldots, A_n\}$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Отношением вероятностной выводимости назовем отношение $C \Rightarrow \widehat{C}$ имеющее место тогда и только тогда, когда $\widehat{C} \gg C$ и $\mu(\widehat{C}) < \mu(C)$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Вероятностной закономерностью или P–правилом будем называть правило $C \in Pr_0$, такое, что из $\widehat{C} \gg C$, $\widehat{C} \in Pr_0$ следует $C \Rightarrow \widehat{C}$.

Таким образом, правило является P–правилом, если оно не может быть обобщено без уменьшения его условной вероятности.

2. Индуктивный синтез логических программ. Совокупность множеств $F(\mathcal{N}) = \{\to A | A$ – атом, $\mathcal{N} \models A\}$, $\mathcal{N} \in G$, составляет полный набор фактов для класса моделей G.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Данными будем называть любую конечную совокупность D конечных подмножеств $D(\mathcal{N}) \subset F(\mathcal{N})$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Вероятностную Эрбранову модель $\mathcal{M}$, согласованную с классом G, будем называть вероятностной моделью данных D.

Пусть имеется некоторое подмножество данных $D(\mathcal{N})$ одной, случайно выбранной из G модели $\mathcal{N}$. Обозначим множество всех P–правил с непустой посылкой, через $P(\mathcal{M})$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Наилучшим правилом для предсказания атома A по данным $D(\mathcal{N})$ в вероятностной модели $\mathcal{M}$, будем называть правило $C = \widehat{A} \leftarrow A_1\&\ldots A_n$, $n \neq 0$, $C \in Pr_0$, такое что:

1) существует θ такая, что $\{A_1\theta, \ldots, A_n\theta\} \subset D(\mathcal{N})$;

2) на правиле C достигается максимум условной вероятности среди правил, удовлетворяющих первому пункту;

3) правило C максимально по отношению $\gg$ среди правил, удовлетворяющих пункту один и два.

ТЕОРЕМА 3. *Все наилучшие правила для предсказания какого–либо атома A сигнатуры Ω по некоторым данным $D(\mathcal{N})$*

в вероятностной модели $\mathcal{M}$, являются вероятностными закономерностями из множества $P(\mathcal{M})$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть правило $C \in Pr_0$ является наилучшим для предсказания атома A, но не является P–правилом. Тогда существует некоторое правило $\widehat{C} : (C \gg \widehat{C})\&(\mu(C) < \mu(\widehat{C}))$ и $\widehat{C}$ удовлетворяет условию 1 определения наилучшего правила. Но тогда для правила C нарушается условие 2 того же определения. Противоречие с тем, что C наилучшее для предсказания атома A правило. Следовательно, C является P–правилом. #

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Множество правил $PR(\mathcal{M}, \mathcal{N}) = P(\mathcal{M} \cup D(\mathcal{N}))$ будем называть программой индуктивно синтезированной по данным D и вероятностной модели $\mathcal{M}$

3. Вероятностный вывод.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Вероятностным выводом или P–выводом произвольного атома A будем называть максимальную последовательность правил $C_1 \Leftarrow C_2 \Leftarrow \ldots \Leftarrow C_k$; $C_i = A_i \leftarrow A_1^i \& \ldots \ldots \& A_{m_i}^i$; $C_i \in P(\mathcal{M})$; такую, что существует θ_i, такая, что $A\theta_i = A_i\theta_i$. Если эта последовательность пуста, то будем говорит, что P–вывод пуст. Последнее правило в P–выводе будем называть результирующим.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. P–деревом вероятностного вывода атома A будем называть совокупность всех P–выводов запроса A.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. P–предсказанием некоторого атома A программой $PR(\mathcal{M}, \mathcal{N})$ будем называть такой P–вывод $C_1 \Leftarrow C_2 \Leftarrow \ldots \Leftarrow C_k$ запроса A, в котором:

1) существует подстановка θ и правило $C_i = A_i \leftarrow A_1^i \& \ldots \ldots \& A_{m_i}^i$ такие, что $\{A_1^i\theta, \ldots, A_m^i\theta\} \subset D(\mathcal{N})$; $A\theta = A_i\theta$; $\mu(A_i\theta) < \mu(C)$;

2) на правиле C_k достигается максимум условной вероятности $\mu(C_i)$ среди всех правил, удовлетворяющих первому пункту;

3) если P–дерево запроса A пусто, то P–предсказание не определено;

4) результатом P–предсказания будем называть подстановку $\theta_p = \theta_1\theta_2 \ldots \theta_k$, где $\theta_1\theta_2 \ldots \theta_k$ — подстановки P–вывода $C_1 \Leftarrow C_2 \Leftarrow \ldots \Leftarrow C_k$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Оценкой P–предсказания будем называть величину $\eta_p(A) = \mu(C_k)$. Если предсказание не определено, то оценка $\eta_p(A)$ не определена.

ТЕОРЕМА 4. *P–предсказание атома A сигнатуры Ω программой $PR(\mathcal{M},\mathcal{N}) = P(\mathcal{M}) \cup D(\mathcal{N})$ определено тогда и только тогда, когда существует наилучшее для предсказания атома A по данным $D(\mathcal{N})$ в вероятностной модели данных $\mathcal{M}$ правило C.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть P–предсказание определено. Тогда существует непустой P–вывод $C_1 \Leftarrow C_2 \Leftarrow \ldots \Leftarrow C_k$; $C_i \in P(\mathcal{M})$, запроса A такой, что для правила $C_k = A_1^k \& \ldots \& A_{i_k}^k$ существует подстановка θ такая $\{A_1^k\theta, \ldots, A_i^k\theta\} \subset D(\mathcal{N})$; $A\theta = A_k\theta$; $\mu(A\theta) < \mu(C)$. А из определения отношения вероятностной выводимости, следует, что C_k максимально по отношению $\gg$ и достигает максимум условной вероятности среди C_i. Таким образом C_k удовлетворяет всем условиям наилучшего правила для предсказания запроса A.

Если $C = \widehat{A} \leftarrow A_1 \& \ldots \& A_k$ — лучшее для предсказания атома A правило, то $C \in P(\mathcal{M}) \subset PR(\mathcal{M},\mathcal{N})$. По определению С, атом $\widehat{A}$ унифицируем с атомом A, следовательно есть P–вывод, содержащий С. Из условий 1 и 2 определения наилучшего правила (см.стр.), прямо следуют условия 1 и 2 определения P–предсказания. Следовательно P–предсказание атома A определено. А условие 3, определения для правила С, говорит нам, что С — результирующее правило в P–выводе, определяющем P–предсказание. #

Из доказательства теоремы видно, что вероятностные закономерности являются результирующими правилами некоторого P–вывода.

4. Соотношение логических и синтезированных программ. Пусть Pr — логическая программа, факты которой содержатся среди фактов программы $PR(\mathcal{M},\mathcal{N}) = P(\mathcal{M} \cup D(\mathcal{N}))$

ТЕОРЕМА 5. *Если атом А предсказывается программой Pr с оценкой $\eta(A)$, то он P–предсказывается программой $PR(\mathcal{M},\mathcal{N})$ с оценкой Р–предсказания $\eta_p(A) \geq \eta(A)$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из условия теоремы, следует, что существует успешный SLDF–вывод $A\theta, N_1\theta, N_k$; $N_i \in F$ запроса A

такой, что $\mu(A\theta/\widehat{N}_k) \geq \eta(A)$, $\mu(\widehat{N}_k > 0)$. По определению успешного вывода $N_k = \leftarrow \mathrm{A}_1\& \ldots \&\mathrm{A}_\mathrm{k}$, т.е. A_i являются фактами.

Рассмотрим правило $\widehat{C} = A\theta \leftarrow \mathrm{A}_1\&\ldots\&\mathrm{A}_\mathrm{k}$. Так как $\eta(A) > 0$, то $\mu(A_1\&\ldots\&Ak) > 0$. Следовательно, существует непустой P–вывод запроса A (он минимум содержит подправила правила $\widehat{C}$), у которого результирующим является правило $C = A\theta \leftarrow A_{1_n}\&\ldots A_{m_n}$; $A_{i_n} \in D(\mathcal{N})$. Этот P–вывод определяет P–предсказание атома A. По условию 2 определения P–предсказания, на правиле C достигается максимум условной вероятности среди правил в посылке у которых стоит конъюнкция фактов из $D(\mathcal{N})$, а в заключении атом, унифицируемый с A. Следовательно, $\eta_p(A) = \mu(C) > \mu(\widehat{C}) = \mu(A\theta/\mathrm{A}_1\&\ldots\&\mathrm{A}_\mathrm{k}) \geq \eta(A)$. #

Рассмотрим P–предсказание $C_1 \Leftarrow C_2 \Leftarrow \ldots \Leftarrow C_k$ запроса A программой $PR(\mathcal{M},\mathcal{N})$ по наилучшему для предсказания атома A правилу $C = \widehat{A} \leftarrow A_1\&\ldots\&A_n$; $\{A_1\ldots A_n\} \subset D(\mathcal{N})$, $A\theta = \widehat{A}\theta$, $\mu(\widehat{A}) < \mu(C)$. Этому P–предсказанию ставим в соответствие SLDF–вывод, который будем обозначать SLDP(A)–вывод. SLDP(A)–вывод представляет собой последовательность запросов $N_0\theta, N_1\theta, \ldots, N_k\theta$: $\leftarrow A\theta$; $\leftarrow A_1\theta\&\ldots\&A_n\theta$; $\ldots \leftarrow \mathrm{A}_1\theta\&\ldots$ $\ldots\&\mathrm{A}_\mathrm{n}\theta$, выводимых по правилам $C, A_1\theta \leftarrow; \ldots; A_n\theta \leftarrow$. Найдем оценку η полученного SLDP(A)–вывода. Мы знаем, что если $C_i = A_i \leftarrow$, то $\mu(C_i) = 1$, следовательно, в неравенстве из теоремы 2, из все слагаемых остается только первое,т.е.

$$\eta = \max_{\theta\in\Theta}\left\{1 - (1-p)\frac{\mu(A_1\theta\&\ldots\&A_n\theta)}{\mu(\widehat{N}_k)}\right\} =$$

$$= max\{1-(1-p)\} = max\{p\},$$

где $p = \mu(C)$. Следовательно, $\eta = \eta_p(A) = \mu(C)$. Из этого равенства и из теоремы 5 непосредственно следует

ТЕОРЕМА 6. *Если атом* A *предсказывается программой* Pr *с оценкой* $\eta(A)$*, то он предсказывается программой* $PR(\mathcal{M},\mathcal{N})$ *с оценкой* $\eta_p(A)$*,* $\eta(A) \leq \eta_p(A)$.

На основании доказанных теорем, сделаем окончательный вывод. В § 2 было показано, что интеллектуальная нейронная сеть представима в виде логической программы, причем с успешным SLDF–выводом. Это значит, что атом A, являющийся выходом нейронной сети,на данных $D(\mathcal{N})$ предсказывается программой Pr_{NN}, представляющей нейронную сеть, с оценкой $\eta_{NN}(A)$ не равной нулю. В § 3 было показано построение P–вывода для предсказания атома A, на основе которого получается программа $PR(\mathcal{M},\mathcal{N})$, с максимальной оценкой предсказания атома A по данным $D(\mathcal{N})$. На основании теоремы 6 сформулируем результирующую теорему.

ТЕОРЕМА 7. *Если атом A, по данным $D(\mathcal{N})$, предсказывается программой Pr_{NN}, с оценкой $\eta_{NN}(A)$, то он предсказывается программой $PR(\mathcal{M},\mathcal{N})$, индуктивно синтезированной по данным $D(N)$ и вероятностной модели $\mathcal{M}$, с оценкой $\eta_p(A)$ такой, что $\eta_{NN}(A) \leq \eta_p(A)$.*

Заключение

Важность этой работы заключается в том, что в ней впервые указан метод спецификации нейронной сети, позволяющий проводить сравнение результатов различных методов получения новых знаний. То, что спецификация может быть получена пока только для интеллектуальных нейронных сетей, не уменьшает значимость этого метода в виду отсутствия алгоритма для построения структуры нейронной сети. Это значит, что алгоритм KBANN является полноправным методом для построения структуры сети. Мы смогли доказать, что семантический вероятностный вывод позволяет получить знания проблемной области с более высокой оценкой предсказания, чем у знаний, полученных с использованием нейронных сетей. Это является наглядным примером использования полученной спецификации для сравнения с другими методами, применяющимися для решения задач анализа данных и знаний.

Литература

1. ГОРБАНЬ А.Н., РОССИЕВ Д.А. Нейронные сети на персональном компьютере, -Новосибирск: Наука. Сиб. отделение, 1996. — 276 с.

2. УОССЕРМЕН Ф. Нейрокомпьютерная техника. — М.: Мир, 1992.

3. МИНСКИЙ М., ПАЙПЕРТ С. Пресептроны. — М.: Мир, 1971.

4. SHAVLIK J.W., TOWELL G.G. An approch to combining explanation — based and neural learning algorithms, Connection Science. — 1989. — Vol. 1. — P. 233–255.

5. TOWELL G.G., Simbolic Knowledge and Neural Networks: insertion, Refinement and Extraction. Doctoral dissertation, Madison, WI: University of Wisconsin, Computer Sciences Department, 1992.

6. NOORDEWIER M.O., TOWELL G.G., SHAVLIK J.W. Training knowledge — based neural networks to recognize genes in DNA sequences. In Advances in Neural Information Processing Sistems. — San Mateo, CA: Morgan Kaufmann. — 1991. — Vol. 3.

7. NOWLAN S.J., HINTON G.E. Simplifying neural networks by soft weight — sharing. In Advances in Neural Information Processing Sistems (vol 4), San Mateo, CA: Morgan Kaufmann. — 1992. — Vol. 4.

8. UTGOFF P.E. Perceptron trees: A casestydy in hybrid consept representations. Proceedings of the Seventh National Conference on Artificial Intrlligence. St. Paul, MN: Morgan Kaufmann. — 1988. P. 601–606.

9. FU L.M. Integration of neural heuristics into knowledge — based inference. Connection Science. — 1989. — Vol. 1. — P. 320–325.

10. FU L.M. Rule learning by searching on adapted nets. Proceedings of the Ninth National Conference on Artificial Intrlligence. Anaheim, CA: AAAI Press. 1991. — P. 590–595.

11. Математическая логика в программировании: Сб. статей. — М.: Мир, 1991. — 408 с.

12. АГАФОНОВ В.Н. Спецификация программ: понятийные средства и их организация, -Новосибирск: Наука. Сиб. отделение, 1990. — 224 с.

13. ГОРБУНОВ В.А. Алгебраическая теория квазимногообразий. — Новосибирск: Научная книга, 1999. — 368 с.

14. МАЛЬЦЕВ А.И. Алгебраические системы, -М: Наука, 1970. — 392 с.

15. ВИТЯЕВ Е.Е. Семантический подход к созданию баз знаний. Семантический вероятностный вывод наилучших для предсказания ПРОЛОГ–программ по вероятностной модели данных //Логика и семантическое программирование. — Новосибирск, 1992. — Вып.: 146: Вычислительные системы. — С. 19–49.

16. ВИТЯЕВ Е.Е. Обнаружение закономерностей (методология, метод, программная система SINTEZ) //Методологические проблемы науки. — Новосибирск, 1991. — Вып. 138: Вычислительные системы. — С. 26–61.

17. ЕРШОВ Ю.Л., САМОХВАЛОВ К.Ф. О новом подходе к философии математики //Структурный анализ символьных последовательностей. — Новосибирск, 1984. —Вып.101: Вычислительные системы. — С. 141–149.

18. GONCHAROV S.S., ERSHOV Yu.L., SVIRIDENKO D.I. Semantic programming, 10th World Congress Information Processing 86. Dublin. Okt. 1986. — Amsterdam. 1986. — P. 1093–1100.

19. GAIFMAN H. Concerning measure in first order calculi //Israel journal of Math. 1964. — Vol. 2, № 1. — P. 1–18.

Поступила в редакцию
10 июня 2002 года