

Algoritmikus modellek és tanulóalgoritmusok a statisztikában

Bolla Marianna, Csicsman József

2013.07.04

Előszó

Jegyzetünk azoknak a hallgatóknak készült, akik matematikai statisztika és többváltozós statisztika tanulmányaik után szeretnék megismerni a modern statisztikai modelleket és módszereket is. A klasszikus statisztika fogalomrendszere és legtöbb tétele a XX. század első felében lett kidolgozva, elsősorban valószínűségszámítási alapokon. Ebben jelentős szerepet játszott az angolszász, orosz és indiai iskola. Érdekes, hogy olyan kulcsfontosságú eredmények, mint a Cramér–Rao egyenlőtlenség, Rao–Blackwellizálás, és a Wald-féle szekvenciális döntési eljárás a II. Világháború idején születtek meg, utóbbi töltények gazdaságos minőségellenőrzésére.

A XX. század közepére kifejlesztették a többváltozós statisztikai eljárásokat is, amelyek széleskörű alkalmazásának azonban csak a nagy teljesítményű számítógépek elterjedése nyitott utat a XX. század második felében (BMDP, SPSS programcsomagok), hiszen ezek a módszerek nagyméretű adatmátrixok és kovarianciamátrixok szinguláris- és spektrális felbontásán alapulnak. Nagyjából ezeket az ismereteket foglalja össze a BME matematikus képzés BSc és MSc statisztika anyagának gerincét képező Bolla–Krámli, Statisztikai következtetések elmélete (Typotex, 2005 és 2012) könyv.

Az 1970-80-as években azonban már ez a tényanyag sem bizonyult elégségesnek. Valós életbeli (biológiai, pszichológiai, szociológiai) adatrendszerekkel foglalkozva azt találtuk, hogy a klasszikus módszerek nem alkalmazhatók mindig közvetlenül, illetve a problémák sokszor túlmutattak a tanult (elsősorban többváltozós normális eloszlású mintákra kifejlesztett) módszerek alkalmazhatósági körén (diszkrét, nem-paraméteres szituációk, időben is változó megfigyelések). L. Breiman, Statistical modeling: the two cultures (Statist. Sci. 16) 2001-es cikkében szintén rámutat arra, hogy gyakorlati problémákkal szembesülve a klasszikus apparátus néha csődöt mond. Az ún. második kultúra egy algoritmikus szemléletet visz a klasszikusba, ami azonban nem a numerikus módszerek automatikus alkalmazását jelenti, hanem olyan elméleti algoritmusok kifejlesztését, melyek az információelmélet, a Hilbert-terek, sőt akár a gráfelmélet eszköztárát használják magas színvonalon. Ebbe az eszköztárba szeretnénk betekintést nyújtani.

Ilyen módon a tankönyv egy, a modern statisztikai módszerek iránt érdeklődő hallgatók számára a BME-n kétfévente tartott kurzus anyaga, de használható témalabor vagy diplomamunka készítéséhez is, illetve az elméleti részek kihagyásával a leírt algoritmusok nagyméretű adatrendszerek adatbányászatával foglalkozó szakemberek számára is hasznosak lehetnek. Az algoritmikus modellek köre egyre terjed, itt csak a legfontosabbakat foglaltuk össze, de utalunk egyéb, hasonló célú eljárásokra, illetve bőséges szakirodalmat közlünk a részletek iránt érdeklődőknek. Az elméleti részek tanulmányozása pedig az arra fogékony olvasók kezébe ötleteket és eszközöket adhat hasonló szituációk kezelésére.

Bolla Marianna,
Csicsman József

Budapest, 2013. július 5.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	4
2. Az EM-algoritmus hiányos adatrendszerekre	6
2.1. Egy konkrét példa	7
2.2. Elméleti megfontolások	9
2.3. Alkalmazások	14
2.3.1. EM-algoritmus normális eloszlások keverékfelbontására	14
2.3.2. EM-algoritmus polinomiális eloszlások keverékfelbontására	20
2.3.3. EM-algoritmus gráfok klaszterezésére	22
Irodalomjegyzék	25
3. Az ACE-algoritmus általánosított regresszióra	26
3.1. Elméleti megfontolások	27
3.2. ACE-algoritmus egymásba ágyazott ciklusokkal	32
3.3. ACE-algoritmus adatmátrixra simításokkal	34
3.4. Az ACE-algoritmus outputja	38
3.5. Alkalmazások	38
Irodalomjegyzék	41
4. Reprodukáló magú Hilbert-terek	42
4.1. Elméleti háttér	42
4.2. Példák	45
4.3. Empirikus kernel	48
4.4. Szemléletes példák	49
Irodalomjegyzék	50
5. Spektrális klaszterezés	51
5.1. Gráfok és hipergráfok reprezentációja	52
5.1.1. Egyszerű és súlyozott gráfok	52

5.1.2.	Hipergráfok	54
5.1.3.	Normált Laplace mátrix	56
5.1.4.	Modularitás mátrix	57
5.1.5.	Nevezetes gráfok spektruma	58
5.2.	Minimális vágások, maximális modularitás	61
5.2.1.	Arányos és kiegyensúlyozott vágások	61
5.3.	Általánosított véletlen gráfok	68
5.3.1.	Felfűjt zajos mátrixok	69
5.3.2.	Reguláris partíciók	72
5.4.	Algoritmusok gráfok és hipergráfok klaszterezésére	73
5.4.1.	Súlyozott gráfok	73
5.4.2.	Hipergráfok kétszempontú klaszterezése	75
5.5.	Irodalom jegyzék	76
Irodalomjegyzék		77
6.	Dinamikus faktoranalízis	84
6.1.	Előzmények és célkitűzések	84
6.2.	A modell	85
6.3.	A paraméterek becslése	87
6.4.	Szimmetrikus mátrixok kompromisszuma	91
6.5.	Alkalmazás	92
Irodalomjegyzék		97
7.	A varianciaanalízis általános modelljei	99
7.1.	Többváltozós varianciaanalízis (MANOVA)	99
7.2.	Nemparaméteres varianciaanalízis	100
Irodalomjegyzék		104

1. fejezet

Bevezetés

Hat fő téma köré csoportosítottuk a tananyagot, mindegyiket külön fejezetben tárgyaljuk, egységes jelölésmóddal és elnevezésekkel. A témák látszólag függetlenek, azonban eszközeikben, tárgyalásmódjukban igyekeztünk a bennük rejlő hasonlóságokat is felfedni.

Az első fejezet az ún. EM (Expectation-Maximization) algoritmussal foglalkozik, mely hiányos adatrendszerből képes becsülni maximum likelihood módszerrel a paramétereket. A likelihood függvény maximumhelyének megkeresése még teljes adatrendszerből is sokszor bonyolult feladat, néha hiányosak is az adatok. Az algoritmus mintegy kihasználva ezt a körülményt, rekonstruálja az adatokat (feltételes várható érték képzéssel, ez az E-lépés), miközben a paramétert a kiegészített adatrendszerből becsli klasszikus maximalizálással (M-lépés). Tárgyaljuk az E- és M-lépések alternálásával kialakított iteráció konvergenciáját, illetve a módszer alkalmazhatóságát keverékek felbontására. Utóbbi esetben nem feltétlenül a paraméter, hanem egy látens változó értékei hiányoznak, melyek a mintaelemek osztálybatartozását adják meg. Tárgyalásunkban az 1977-ben megjelent Dempster–Laird–Rubin alapcikket követjük, de beszélünk az azóta elterjedt ún. collaborative filterigről is.

A második fejezet az ACE (Alternating Conditional Expectation) algoritmust ismerteti általánosított regresszióra, mikor nemcsak a függő és független változók közti függvénykapcsolat jellege ismeretlen, hanem a változók vegyes (diszkrét és folytonos) típusúak is lehetnek. Az ismertített iteráció az adatrendszer simításával szemléletes képet nyújt a változók optimális linearizáló transzformációiról. A Breiman–Friedman 1985-ös alapcikket követjük, és a Hilbert-terek lineáris transzformációit vizsgáló elmélet mellett kitérünk a feltételes várható érték képzésnek simításokkal történő gyakorlati megvalósítására sokváltozós adatrendszereken.

A harmadik fejezet speciális Hilbert-terekkel foglalkozik, melyeket egy pozitív definit magfüggvény generál. Az ún. kernel-trükk – amit elsősorban az adatokban levő nem-linearitások kezelésére használnak – abban áll, hogy adatainkat nem feltétlenül kell az ún. Reprodukáló Magú Hilbert Térbe (RMHT) leképezni, elég csak a páronkénti kovarianciákat a magfüggvénnyel kiszámolni, legalábbis olyan módszereknél, melyek a

kovarianciamátrixot használják inputként (a főkomponens- és faktoranalízis pl. ilyen). Rámutatunk, hogy a módszer mögött meghúzódó elmélet a Riesz–Fréchet Reprezentációs Tétel, melynek értelmében egy Hilbert-tér és duálisa (az azon értelmezett lineáris funkcionálok) izometrikusan izomorfak. Nagyon vázlatosan, a nem-lineáris funkcionálok már egy bonyolultabb Hilbert-tér elemeinek feleltethetők meg (ez az RMHT). Bemutatjuk, hogyan lehet a szokásos klaszterező eljárásokkal nem szétválasztható, de szemmel láthatóan különböző (nem lineárisan szeparált) klasztereket megtalálni.

A negyedik fejezet élsúlyozott gráfok és hipergráfok klaszterezéséről szól spektrális módszerekkel. Az ún. spektrális klaszterezés lényege, hogy először a csúcsokat (a köztük levő hasonlóságok, azaz a súlyozott élek) alapján egy véges dimenziós térbe képezzük le, a többváltozós statisztikai módszereknél használt spektrálfelbontási technikákkal. Ezután a reprezentánsok metrikus klaszterezésével polinomiális időben vagyunk képesek megkeresni minimális többszempon-tú vágásokat vagy maximalizálni az ún. Newman–Girvan modularitást. A minimális vágások és maximális modularitások olyan csúcspartíciókat keresnek, melyeken belül nagy az élsűrűség. Az összes partícióon való optimalizálás azonban nagy csúcsszám esetén nem kivitelezhető (exponenciális idejű), ezért használjuk a fenti ún. spektrális relaxációt. Ilyen módon a csúcsklasztterekre csak közelítő megoldást kapunk, azonban a közelítés jóságát a spektrumbeli résekkel becsülni tudjuk, és az osztályok számát úgy választjuk meg, hogy jó közelítést kapjunk. Foglalkozunk még kis diszkrepanciájú ún. reguláris vágásokkal, általánosított véletlen gráfokkal, és adatpontok spektrális klaszterezésével. Utóbbi esetben egy hasonlósági gráfot építünk, például RMHT technikákat használva.

Az ötödik fejezetbeli Dinamikus Faktoranalízis többváltozós idősorok komponenseiből választ le független faktorokat, melyek időbeli lefutása a sok összefüggő komponenst tartalmazó idősor fő tendenciáit mutatja. A faktorfolyamatok autoregresszív modellt követnek. Ennek együthetói és a faktorsúlyok a modell paraméterei, ezek becslésére adunk egy mátrixfelbontásokon alapuló iterációs eljárást. Az algoritmus tárgyalásán túl egy alkalmazást is bemutatunk makroökológiai idősorokra.

A hatodik fejezet a varianciaanalízis (ANOVA) általános modelljeit tárgyalja. A többváltozós varianciaanalízis (MANOVA) a szórások felbontása helyett a kovarianciamátrixok felbontásán alapul, és többdimenziós normális sokaságból vett minta esetén hasonlóan működik az ANOVA-hoz. A másik módszer újszerűbb, rangstatisztikákon alapul, és tetszőleges, akár vegyes eloszlású változókra is alkalmazható. A Brunner–Puri alapcikk felhasználásával írjuk le a módszert, majd a kapott becslők konzisztenciájára, aszimptotikus normalitására idézzük az ott bizonyított tételeket.

A fejezetek elvileg tetszőleges sorrendben olvashatók, külön irodalomjegyzékkel rendelkeznek, mégis ezt a sorrendet javasoljuk tanulmányozásukra, a néha egymásra épülő jelölések és kereszthivatkozások miatt.

2. fejezet

Az EM-algoritmus hiányos adatrendszerre

*„Süvítének napjaink, a forró sortüzek
– valamit minden nap elmulasztunk.
Robotolunk lélekszakadva, jóttevőn,
– s valamit minden tettben elmulasztunk...”
(Váci Mihály: Valami nincs sehol)*

1976. december 8-án Londonban, a Királyi Statisztikai Társaság ülésén érdekes előadás hangzott el. Egy olyan algoritmust ismertettek, amelyet különböző formákban a paraméterek maximum likelihood becslésére már régóta használtak, azonban ilyen általános formában még soha nem fogalmazták meg. Az algoritmus eredeti leírása konvergenciabizonyítással és példákkal [5]-ben található.

Az ún. EM-algoritmus célja az, hogy becslést adjon a háttéreloszlás valamely θ paraméterére hiányos adatokból. A paraméter maximum likelihood becslése még teljes adatrendszerből is bonyolult, sokszor nem is adható explicit megoldás. Gyakran hiányos is az adatrendszer. Az ismertetendő algoritmus kihasználva ezt a körülményt, megpróbálja rekonstruálni a hiányzó adatokat, miközben a paraméterre is egyre jobb becslést ad. Ez a kétféle törekvés egy iteráció következő két alaplépésében valósul meg:

1. **E**-lépés: a paraméter korábbi becslése alapján rekonstruáljuk a hiányzó adatokat feltételes várható érték képzéssel (E: „Expectation”);
2. **M**-lépés: az ilyen módon kiegészített teljes adatrendszerből meghatározzuk a likelihood-fv. maximumhelyét θ -ban (M: „Maximization”).

A paraméter így nyert közelítésével újra kezdjük az **E**-lépést. Tág feltételek mellett Dempster, Laird és Rubin [5] bebizonyították az algoritmus konvergenciáját. Az algoritmus nem csupán akkor alkalmazható, amikor bizonyos változók mérései nem állnak

rendelkezésünkre, hanem cenzorát adatok vagy keverékfelbontás esetén is. Még általánosabban, az adatrendszer úgy is tekinthetjük hiányosnak, hogy látens változók vagy egy rejtett modell húzódik meg mögötte (pl. Baum–Welch algoritmus rejtett Markov-modellekre). Ilyenkor a modell paramétereinek becslése a feladat. Néha csupán technikai okokból egészítjük ki adatrendszerünket, mert a kiegészítettben könnyebben végre tudjuk hajtani az ML-becslést (l. a következő példa). Tételek viszont garantálják, hogy az iteráció az eredeti (hiányos) likelihoodot maximalizálja.

A hivatkozott cikk jelöléseivel: legyen \mathcal{X} a teljes, \mathcal{Y} pedig a hiányos mintatér, amelyek között tehát létezik egy

$$\mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}, \quad \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}(\mathbf{x})$$

megfeleltetés. Jelölje $f(\mathbf{x}|\underline{\theta})$ ill. $g(\mathbf{y}|\underline{\theta})$ a megfelelő eloszlások együttes sűrűség- ill. vsz.-függvényét, azaz a likelihood-függvényt, amely a $\underline{\theta}$ akár többdimenziós paramétertől függ (itt az abszolút folytonos esetet tekintjük). Köztük a

$$g(\mathbf{y}|\underline{\theta}) = \int_{\mathcal{X}(\mathbf{y})} f(\mathbf{x}|\underline{\theta}) d\mathbf{x} \quad (2.1)$$

összefüggés közvetít (diszkrét eloszlásoknál az \int helyett \sum értendő), ahol

$$\mathcal{X}(\mathbf{y}) = \{\mathbf{x} : \mathbf{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{y}\}.$$

Célunk a $g(\mathbf{y}|\underline{\theta})$ hiányos likelihood függvény maximalizálása $\underline{\theta}$ -ban az \mathbf{y} megfigyelés alapján.

2.1. Egy konkrét példa

Tekintsünk egy genetikai példát (l. Rao [9], 5.5.g. fejezet)! $(AB|ab)$ genotípusú hímek és ugyanilyen genotípusú nőtények keresztezéséből származó 197 utód fenotípusa négyféle lehet: AB , Ab , aB és ab . A modell szerint az utódok polinomiális eloszlás szerint tartoznak a négy fenotípus valamelyikéhez, az osztályok valószínűségei rendre: $\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\pi$, $\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\pi$, $\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\pi$ és $\frac{1}{4}\pi$; itt π a modell paramétere (Rao példájában $\pi = (1 - \theta)^2$, ahol θ az ún. rekombinációs hányados).

A megfigyelt (hiányos) adatok:

$$\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3, y_4) = (125, 18, 20, 34).$$

Itt \mathbf{y} tulajdonképpen egy 4 alternatívájú indikátorváltozó összegstatisztikája, mely polinomiális eloszlást követ. A likelihood függvény tehát

$$g(\mathbf{y}|\pi) = \frac{(y_1 + y_2 + y_3 + y_4)!}{y_1!y_2!y_3!y_4!} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\pi\right)^{y_1} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\pi\right)^{y_2} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\pi\right)^{y_3} \left(\frac{1}{4}\pi\right)^{y_4}.$$

A feladat g maximalizása π -ben. Ecélből egy olyan algebrai egyenletet kell megoldani, aminek számos gyöke van, közülük csak kettőt lehet explicit módon megadni. A feladat természetesen numerikusan viszonylag egyszerűen megoldható, az alábbiakban ismertetett eljárás az EM-algoritmus egy jól követhető illusztrációja.

A fenti adatrendszert technikai okokból hiányosnak tekintjük, amely a valódi, 5 csoportból álló adatrendszerből úgy keletkezett, hogy az első 2 csoport összevonódott. A teljes adatrendszer tehát:

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5), \quad \text{ahol} \quad y_1 = x_1 + x_2, \quad y_2 = x_3, \quad y_3 = x_4, \quad y_4 = x_5.$$

\mathbf{x} nem más, mint egy 5 alternatívájú indikátorváltozó összegstatisztikája, melyre felírt polinomiális likelihood:

$$f(\mathbf{x}|\pi) = \frac{(x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5)!}{x_1!x_2!x_3!x_4!x_5!} p_1^{x_1} p_2^{x_2} p_3^{x_3} p_4^{x_4} p_5^{x_5},$$

ahol

$$p_1 = \frac{1}{2}, \quad p_2 = \frac{1}{4}\pi, \quad p_3 = p_4 = \frac{1}{4} - \frac{1}{4}\pi, \quad p_5 = \frac{1}{4}\pi.$$

Az (2.1)-beli integrálnak diszkrétben megfelelő összeg:

$$g(\mathbf{y}|\pi) = \sum_{x_1+x_2=y_1, x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \text{ egész}, x_3=y_2, x_4=y_3, x_5=y_4} f(\mathbf{x}|\pi).$$

Ezután kezdődjek az iteráció valamely $\pi^{(0)}$ kezdőértékkel! Tegyük fel, hogy az m -edik lépés után már megvan a $\pi^{(m)}$ közelítés. Az $m+1$ -edik lépés a következő két lépésből fog állni:

1. **E**-lépés: az \mathbf{y} megfigyelés alapján rekonstruáljuk az \mathbf{x} adatrendszert azaz meghatározzuk x_1 és x_2 – $y_1 = 125$ és $\pi = \pi^{(m)}$ feltételek melletti – feltételes várható értékeit. Mivel x_1 , illetve x_2 a fenti feltételek mellett – x_3 , x_4 és x_5 értékétől függetlenül – $\mathcal{Bin}_{125}\left(\frac{\frac{1}{2}}{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\pi^{(m)}}\right)$ illetve $\mathcal{Bin}_{125}\left(\frac{\pi^{(m)}}{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\pi^{(m)}}\right)$ eloszlású, ezért

$$x_1^{(m)} = 125 \cdot \frac{\frac{1}{2}}{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\pi^{(m)}} \quad \text{és} \quad x_2^{(m)} = 125 \cdot \frac{\frac{1}{4}\pi^{(m)}}{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\pi^{(m)}}.$$

2. **M**-lépés: az ilyen módon kiegészített $(x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, 18, 20, 34)$ teljes adatrendszerből meghatározzuk π maximum likelihood becslését, és ezt $\pi^{(m+1)}$ -gyel jelöljük. Ecélből vonjuk össze maximalizálandó $f(\mathbf{x}|\pi)$ likelihood függvény $\pi^{(m)}$ -től nem függő tényezőit egyetlen konstansba:

$$f(\mathbf{x}|\pi) = \text{const} \cdot \left(\frac{1}{4}\pi\right)^{x_2^{(m)}+34} \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\pi\right)^{18+20}.$$

Ezt a kifejezést $4x_2^{(m)+34+18+20}$ -nal megszorozva a maximalizálandó függvény az alábbi alakot ölti:

$$\tilde{f}(\mathbf{x}|\pi) = \text{const} \cdot (\pi)^{x_2^{(m)+34}} \cdot (1 - \pi)^{18+20},$$

ami a Bernoulli eloszlás likelihood függvénye, tehát a maximumát a

$$\pi^{(m+1)} = \frac{x_2^{(m)} + 34}{x_2^{(m)} + 34 + 18 + 20}$$

értéken veszi fel.

Ezzel a $\pi^{(m+1)}$ értékkel visszatérünk az **E**-lépéshez. Az iterációt $\pi^{(0)} = 0.5$ -el indítva 2-3 lépés után π értéke 0.6 körül stabilizálódott.

2.2. Elméleti megfontolások

Legyen statisztikai mezőnk dominált, paraméteres, identifikálható és reguláris (a Cramer–Rao egyenlőtlenségnél tanult bederiválhatósági feltételek teljesülnek). Tegyük fel, hogy mintánk exponenciális eloszláscsaládból származik, ahol természetes paraméterezést választunk, azaz a sűrűség/súly-függvény

$$f(x|\underline{\theta}) = c(\underline{\theta}) \cdot e^{\sum_{j=1}^k \theta_j t_j(x)} \cdot h(x)$$

alakú, ahol $c(\underline{\theta})$ normáló tényező és a $\underline{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_k)$ természetes paramétertől való függést feltételként jelöljük (nem ok nélkül, ui. a Bayes módszeréhez hasonló megfontolásokat használunk). Tudjuk, hogy egy $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ n -elemű minta esetén $t(\mathbf{X}) = (\sum_{i=1}^n t_1(X_i), \dots, \sum_{i=1}^n t_k(X_i))$ elégséges, sőt – amennyiben a k -dimenziós paraméterter konvex és tartalmaz k -dimenziós téglát – teljes is, így minimális elégséges statisztika, ami ekvivalencia erejéig egyértelmű. Tehát a realizáltakkal felírt likelihood-függvény a következő alakú:

$$f(\mathbf{x}|\underline{\theta}) = c^n(\underline{\theta}) \cdot e^{\sum_{j=1}^k \theta_j \sum_{i=1}^n t_j(x_i)} \cdot \prod_{i=1}^n h(x_i) = \frac{1}{a(\underline{\theta})} \cdot e^{\underline{\theta} \cdot t^T(\mathbf{x})} \cdot b(\mathbf{x}), \quad (2.2)$$

ahol a vektorok sorvektorok, T a transzponálást jelöli (így az exponensben tulajdonképpen skalárszorzat áll), az utolsó tényező csak a mintától az első pedig csak a paramétertől függ és a normális miatt

$$a(\underline{\theta}) = \int_{\mathcal{X}} e^{\underline{\theta} \cdot t^T(\mathbf{x})} \cdot b(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (2.3)$$

Jelen esetben az iteráció végigkövethető a t minimális elégséges statisztikán keresztül a következőképpen. Miután \mathbf{Y} (a megfigyelt hiányos adatrendszer) az \mathbf{X} (a posztulált

teljes adatrendszer) függvénye, \mathbf{X} feltételes sűrűsége \mathbf{x} -ben az $\mathbf{Y} = \mathbf{y}$ feltétel mellett (2.1) és (2.2) figyelembevételével

$$k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}) = \frac{f(\mathbf{x}|\underline{\theta})}{g(\mathbf{y}|\underline{\theta})} = \frac{1}{a(\underline{\theta}|\mathbf{y})} \cdot e^{\underline{\theta} \cdot t^T(\mathbf{x})} \cdot b(\mathbf{x}), \quad (2.4)$$

ahol

$$a(\underline{\theta}|\mathbf{y}) = \int_{\mathcal{X}(\mathbf{y})} e^{\underline{\theta} \cdot t^T(\mathbf{x})} \cdot b(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (2.5)$$

Azaz a feltétel nélküli és a feltételes likelihood ugyanazzal a természetes paraméterrel és elégséges statisztikával írható fel, a különbség csak az, hogy különböző tereken – \mathcal{X} -en ill. $\mathcal{X}(\mathbf{y})$ -on – vannak értelmezve, ami a (2.3) ill. (2.5)-beli súlyfüggvényeken is látszik.

Célunk az $L(\underline{\theta}) := \ln g(\mathbf{y}|\underline{\theta})$ log-likelihood függvény maximalizálása $\underline{\theta}$ -ban adott \mathbf{y} mellett. (2.4) miatt

$$L(\underline{\theta}) = -\ln a(\underline{\theta}) + \ln a(\underline{\theta}|\mathbf{y}). \quad (2.6)$$

A bederiválhatósági feltételek miatt

$$\frac{\partial}{\partial \underline{\theta}} \ln a(\underline{\theta}) = \frac{1}{a(\underline{\theta})} \int_{\mathcal{X}} t(\mathbf{x}) \cdot e^{\underline{\theta} \cdot t^T(\mathbf{x})} \cdot b(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbb{E}(t|\underline{\theta}). \quad (2.7)$$

Hasonlóan

$$\frac{\partial}{\partial \underline{\theta}} \ln a(\underline{\theta}|\mathbf{y}) = \frac{1}{a(\underline{\theta}|\mathbf{y})} \int_{\mathcal{X}(\mathbf{y})} t(\mathbf{x}) \cdot e^{\underline{\theta} \cdot t^T(\mathbf{x})} \cdot b(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbb{E}(t|\mathbf{y}, \underline{\theta}).$$

(Ez csak tömör jelölés: A vektor szerinti deriválás eredménye a komponensek szerinti parciális deriváltakból álló vektor.) Ezek segítségével (2.6) deriváltja

$$\frac{\partial}{\partial \underline{\theta}} L(\underline{\theta}) = -\mathbb{E}(t|\underline{\theta}) + \mathbb{E}(t|\mathbf{y}, \underline{\theta}) \quad (2.8)$$

alakú, aminek zérushelyét keressük.

Nézzük most a következő iterációt, melyben már eljutottunk $\underline{\theta}$ m -edik becsléséig.

1. **E**-lépés: a paraméter $\underline{\theta}^{(m)}$ értéke alapján becsljük a teljes adatrendszer t elégséges statisztikáját a hiányos adatrendszerből

$$t^{(m)} := \mathbb{E}(t|\mathbf{y}, \underline{\theta}^{(m)}) \quad (2.9)$$

a feltételes eloszlás alapján (a példában ezek a binomiális eloszlású változók becslései);

2. **M**-lépés: meghatározzuk $\underline{\theta}^{(m+1)}$ -et, mint a teljes minta likelihood-egyenletének megoldását, azaz

$$\frac{\partial}{\partial \underline{\theta}} \ln f(\mathbf{x}|\underline{\theta}) = \mathbf{0}.$$

Használva az exponenciális eloszláscsalád speciális alakját, ez nem más, mint a

$$-\frac{\partial}{\partial \underline{\theta}} \ln a(\underline{\theta}) + t^{(m)}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (2.10)$$

egyenlet, azaz (2.7) figyelembevételével az

$$\mathbb{E}(t|\underline{\theta}) = t^{(m)} \quad (2.11)$$

egyenlet megoldása lesz $\underline{\theta}^{(m+1)}$.

Amennyiben az iteráció $\underline{\theta}^*$ -hoz konvergál, elég nagy m -re $\underline{\theta}^{(m)} = \underline{\theta}^{(m+1)} = \underline{\theta}^*$, így (2.9) és (2.11) alapján

$$\mathbb{E}(t|\underline{\theta}^*) = \mathbb{E}(t|\mathbf{y}, \underline{\theta}^*)$$

teljesül, azaz (2.8) zérushelyét kapjuk.

Most még általánosabban belátjuk, hogy az iteráció konvergál. Az általánosság egyrészt azt jelenti, hogy nem csupán exponenciális eloszláscsaládra szorítkozunk, másrészt az **M**-lépés sem feltétlenül a teljes likelihood maximalizálását jelenti, csak a célfüggvény növelését. Mivel információelméleti fogalmakat használunk, a természetes alapú logaritmus helyett 2 alapút használunk és log-gal jelöljük. Ez nem jelenti az általánosság megszorítását, hiszen a hiányos likelihoodnak a $\underline{\theta}$ argumentumban való maximalizálása $\arg \max$ szempontjából ekvivalens a likelihood függvény bármely 1-nél nagyobb alapú logaritmusának a maximalizálásával. Így a továbbiakban $L(\underline{\theta}) = \log g(\mathbf{y}|\underline{\theta})$ lesz a maximalizálandó log-likelihood függvény.

Tetszőleges $\underline{\theta}, \underline{\theta}'$ párra vezessük be a

$$Q(\underline{\theta}|\underline{\theta}') = \mathbb{E}(\log f(\mathbf{x}|\underline{\theta})|\mathbf{y}, \underline{\theta}') = \int_{\mathcal{X}(\mathbf{y})} \log f(\mathbf{x}|\underline{\theta}) k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}') d\mathbf{x} \quad (2.12)$$

függvényt. Ezzel az iteráció $\underline{\theta}^{(m)} \rightarrow \underline{\theta}^{(m+1)}$ fázisa:

1. **E**-lépés: kiszámoljuk a $Q(\underline{\theta}|\underline{\theta}^{(m)})$ függvényt a (2.12)-beli feltételes várható érték képzéssel (exponenciális eloszláscsaládnál elég volt az elégséges statisztika feltételes várható értékét venni);
2. **M**-lépés: maximalizáljuk a $Q(\underline{\theta}|\underline{\theta}^{(m)})$ függvényt $\underline{\theta}$ -ban. Legyen

$$\underline{\theta}^{(m+1)} := \arg \max Q(\underline{\theta}|\underline{\theta}^{(m)})$$

és tegyük fel, hogy $\underline{\theta}^{(m+1)} \in \Theta$. Exponenciális eloszláscsaládnál ez a (2.10) egyenlet megoldását jelenti.

Most belátjuk, hogy az algoritmus következő relaxációja is konvergál: az \mathbf{M} -lépésben $Q(\underline{\theta}|\underline{\theta}^{(m)})$ -et nem feltétlenül maximalizáljuk $\underline{\theta}$ -ban, hanem csak növeljük értékét az előző iterációbelihez képest. Azaz $\underline{\theta}^{(m+1)}$ olyan, hogy

$$Q(\underline{\theta}^{(m+1)}|\underline{\theta}^{(m)}) \geq Q(\underline{\theta}^{(m)}|\underline{\theta}^{(m)}). \quad (2.13)$$

Vezessük be a

$$H(\underline{\theta}|\underline{\theta}') = \mathbb{E}(\log k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta})|\mathbf{y}, \underline{\theta}') = \int_{\mathcal{X}(\mathbf{y})} \log k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}) k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}') d\mathbf{x} \quad (2.14)$$

jelölést.

2.1. Lemma

$$H(\underline{\theta}|\underline{\theta}') \leq H(\underline{\theta}'|\underline{\theta}')$$

és egyenlőség pontosan akkor áll fenn, ha $k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}) = k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}')$ majdnem biztosan.

(Megjegyezzük, hogy $H(\underline{\theta}|\underline{\theta})$ a $k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta})$ eloszlás entrópiája.)

Bizonyítás: Alkalmazzuk a Jensen-egyenlőtlenséget, melynek értelmében tetszőleges h konvex függvényre és első momentummal rendelkező ξ valószínűségi változóra $\mathbb{E}(h(\xi)) \geq h(\mathbb{E}(\xi))$. Emiatt az f eloszlás relatív entrópiája a g eloszlásra $\int f \log \frac{f}{g} \geq 0$, ui. alkalmazzuk a Jensen-egyenlőtlenséget a $h(x) = -\log(x)$ konvex függvényre és az f eloszlás szerinti várható értékre:

$$\int f \log \frac{f}{g} = \mathbb{E}(-\log \frac{g}{f}) \geq -\log(\mathbb{E}(\frac{g}{f})) = -\log \int \frac{g}{f} f = -\log 1 = 0. \quad (2.15)$$

Mivel

$$H(\underline{\theta}'|\underline{\theta}') - H(\underline{\theta}|\underline{\theta}') = \int_{\mathcal{X}(\mathbf{y})} \log \frac{k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}')}{k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta})} k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}') d\mathbf{x},$$

nem más, mint a $k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta}')$ eloszlás relatív entrópiája a $k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta})$ eloszlásra nézve, így a lemma értelmében nem-negatív. Az integrál pontosan akkor 0, ha a nem-negatív integrandus majdnem biztosan 0, azaz a logaritmálandó hányados majdnem biztosan 1. Ezzel a bizonyítást befejeztük.

2.2. Definíció A $\underline{\theta}^{(m+1)} = M(\underline{\theta}^{(m)})$ iteráció általánosított EM-algoritmust (GEM) definiál, ha

$$Q(M(\underline{\theta})|\underline{\theta}) \geq Q(\underline{\theta}|\underline{\theta}), \quad \forall \underline{\theta} \in \Theta.$$

Tehát (2.13) fennállásakor GEM algoritmusunk van.

2.3. Tétel Tetszőleges GEM algoritmusra

$$L(M(\underline{\theta})) \geq L(\underline{\theta}), \quad \forall \underline{\theta} \in \Theta,$$

ahol egyenlőség pontosan akkor áll fenn, ha $k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, M(\underline{\theta})) = k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta})$ és $Q(M(\underline{\theta})|\underline{\theta}) = Q(\underline{\theta}|\underline{\theta})$ majdnem biztosan teljesülnek.

Bizonyítás: Először is

$$Q(\underline{\theta}|\underline{\theta}') - H(\underline{\theta}|\underline{\theta}') = \mathbb{E}(\log(f(\mathbf{x}|\underline{\theta}) - \log(k(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \underline{\theta})|\mathbf{y}, \underline{\theta}')) = \mathbb{E}(\log(g(\mathbf{y}|\underline{\theta}))|\mathbf{y}, \underline{\theta}') \quad (2.16)$$

$$= \log(g(\mathbf{y}|\underline{\theta})) = L(\underline{\theta}), \quad (2.17)$$

mivel $\log(g(\mathbf{y}|\underline{\theta}))$ mérhető \mathbf{y} -ra. Ezután

$$L(M(\underline{\theta})) - L(\underline{\theta}) = [Q(M(\underline{\theta})|\underline{\theta}) - Q(\underline{\theta}|\underline{\theta})] + [H(\underline{\theta}|\underline{\theta}) - H(M(\underline{\theta})|\underline{\theta})] \geq 0,$$

mivel az első Szögletes zárójelben álló mennyiség nem-negatív a GEM definíciója miatt, a másodikban álló pedig a lemma miatt. Ezzel a bizonyítást befejeztük.

Ha a likelihood-függvény korlátos, akkor a GEM – mivel minden iterációs lépésben növeli (nem csökkenti) a likelihood-függvény értékét – konvergál, és exponenciális eloszláscsaládnál láttuk, hogy a fixpont a likelihood-egyenlet megoldását adja. A likelihood-függvényre tett további folytonossági és differenciálhatósági feltételek, továbbá a paraméterter konvexitása esetén belátható, hogy az iteráció a likelihood-függvény egy lokális maximumhelyéhez konvergál $\bar{\Theta}$ -ban, ami egyértelműség esetén globális maximumhely is. [5] cikkben mondják ki ehhez a pontos feltételeket. Ha ilyen feltételek nincsenek, [8]-ben példákat mutatnak egyéb eshetőségekre (pl. nyeregpontra).

A [4] monográfiában Csiszár Imre bebizonyítja, hogy az EM-algoritmus nem más, mint egy alternálva minimalizáló eljárás az I-divergenciára. A \mathbb{P} és \mathbb{Q} eloszlások I-divergenciája a (2.15)-beli relatív entrópia azzal a különbséggel, hogy itt a két eloszlás ugyanazon a véges tartón értelmezett diszkrét eloszlás:

$$D(\mathbb{P}|\mathbb{Q}) = \sum_a \mathbb{P}(a) \log \frac{\mathbb{P}(a)}{\mathbb{Q}(a)}.$$

Az I-divergencia nem szimmetrikus az argumentumaiban, viszont az euklideszi távolsághoz hasonló tulajdonságai vannak. Ezekre alapul az az állítás, hogy az EM-algoritmus során

$$D(\mathbb{P}_1|\mathbb{Q}_0) \geq D(\mathbb{P}_1|\mathbb{Q}_1) \geq D(\mathbb{P}_2|\mathbb{Q}_1) \geq D(\mathbb{P}_2|\mathbb{Q}_2) \geq \dots,$$

ahol a \mathbb{Q}_0 felvett kezdeti eloszlásból kiindulva $\mathbb{Q}_1, \mathbb{Q}_2, \dots$ rekonstruálja a teljes minta ismeretlen eloszlását, míg $\mathbb{P}_m = \mathbb{E}_{\mathbb{Q}_{m-1}}(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ a teljes minta hiányosra vett feltételes várható értéke, amennyiben a teljes minta eloszlása \mathbb{Q}_{m-1} . A [4] jegyzetben a szerzők bebizonyítják, hogy a fenti eljárás konvergál az ismeretlen valódi \mathbb{Q} eloszláshoz, mivel a nem-negatív I-divergencia minden lépésben csökken (nem növekszik). (Itt most általánosabban, nem a paramétert becslik, hanem magát az ismeretlen eloszlást, azaz az EM algoritmus nem-paraméteres verzióját kapjuk.)

2.3. Alkalmazások

Gyakori feladat a többdimenziós normális eloszlás paramétereinek becslése hiányos adatokból. Pl. adatrendszerünk pácienseken mért folytonos változók értékeit tartalmazza (pl. testmagasság, testsúly, vérnyomás), de bizonyos páciensek bizonyos mért értékei hiányoznak (nem vették fel vagy elvesztek).

1. **E-lépés:** a paraméter valamely $\underline{\theta}^{(m)}$ értéke alapján becsüljük a hiányzó adatokat feltételes várható érték képzéssel.
2. **M-lépés:** az így kiegészített teljes adatrendszerben a jól ismert módon maximum likelihood becslést hajtunk végre a paraméterekre (mintaátlag ill. empirikus kovarianciamátrix).

Azonban nem feltétlenül a mérések hiányosak, lehet, hogy valamit meg sem néztünk, pl. elfelejtettük, hogy a páciensek mely betegcsoportból valók, vagy éppenséggel most szeretnénk új diagnosztikai csoportokat definiálni (a látens változó véges értékészletű).

Adatbányászatban nagy mintáknál előfordul, hogy a mintaelemek bár függetlenek, nem azonos eloszlásúak. Ilyenkor gyakran feltesszük, hogy nem homogén mintánk különböző (paraméterű, de azonos típusú) eloszlások keveréke, azaz a sűrűség/súlyfüggvény véges sok különböző paraméterű sűrűség/súlyfüggvény szuperpozíciója.

2.3.1. EM-algoritmus normális eloszlások keverékfelbontására

Gyakran folytonos sokaságból származó mintánk empirikus sűrűség-hisztogramja több kiugró csúccsal rendelkezik; úgy néz ki, mint Gauss-görbék szuperpozíciója. (Pl. folyók vízszintjének tetőzési értékei megfelelhetnek a tavaszi és nyár eleji árhullámnak; vagy a forgalomban levő részvénymennyeség a tőzsdén nyitás után és zárás előtt mutat egy-egy csúcsot, ezeket szeretnénk sok nap 8-9 órás adatai alapján szétválasztani.) Ilyenkor keressük a komponensek paramétereit és arányát. Az EM-algoritmus szemléltetéséül egy [6]-beli példát ismertetek két komponens szétválasztására.

Háttéreloszlásunk változóját jelölje Y , amely az Y_1 és Y_2 Gauss-eloszlású változók keveréke, ahol a keverési arányt a Δ Bernoulli-eloszlású háttérváltozó jelöli. Amennyiben Δ a 0 értéket veszi fel, az első (Y_1 által képviselt), amennyiben az 1 értéket veszi fel, a második (Y_2 által képviselt) Gauss-eloszlás van érvényben. Tehát modellünk a következő:

$$Y = (1 - \Delta)Y_1 + \Delta Y_2,$$

ahol a modell paramétereit: (μ_j, σ_j^2) az j -edik Gauss-eloszlás paramétereit ($j = 1, 2$) és π a látens Bernoulli-változó paramétere (Δ az 1 értéket π valószínűséggel veszi fel, a 0 értéket pedig $1 - \pi$ valószínűséggel). Azaz

$$\underline{\theta} = (\mu_1, \sigma_1^2, \mu_2, \sigma_2^2, \pi).$$

Y sűrűségfüggvénye tehát

$$g(y|\underline{\theta}) = (1 - \pi)f_1(y) + \pi f_2(y),$$

ahol f_j a (μ_j, σ_j^2) paraméterű Gauss-sűrűség. Amennyiben n -elemű független mintánk realizáltja az y_1, \dots, y_n mért értékekből áll, a likelihood-függvény

$$g(\mathbf{y}|\underline{\theta}) = \prod_{i=1}^n g(y_i|\underline{\theta}) = \prod_{i=1}^n [(1 - \pi)f_1(y_i) + \pi f_2(y_i)]$$

alakú, melyet vagy melynek logaritmusát maximalizálni $\underline{\theta}$ -ban bonyolult feladat. Ezért a következő iterációt hajtjuk végre. (Összhangban az elméleti meggondolásokkal, itt is g a hiányos minta likelihoodja. A teljes minta likelihoodja a két csoport kétféle likelihoodjának a szorzata lenne, de ezt nem tudjuk felírni, mert nem ismerjük az egyes mintaelemek csoportba tartozását.)

0. Inicializálás. A paraméterekhez kezdőértéket rendelünk:

$$\underline{\theta}^{(0)} = (\mu_1^{(0)}, \sigma_1^{2(0)}, \mu_2^{(0)}, \sigma_2^{2(0)}, \pi^{(0)}).$$

(Pl. $\pi^{(0)}$ lehet $1/2$, a két várható érték lehet két szélsőséges érték, a szórások mindegyike pedig az empirikus.) Tehát $m := 0$ és tegyük fel, hogy már eljutottunk a $\underline{\theta}^{(m)} = (\mu_1^{(m)}, \sigma_1^{2(m)}, \mu_2^{(m)}, \sigma_2^{2(m)}, \pi^{(m)})$ iteráltig. A következő lépésben E-M belső ciklus jön:

1. E-lépés: kiszámoljuk az egyes mintaelemek „részarányát” a kétféle eloszlásban, azaz az $\mathbb{E}(\Delta | Y = y_i)$ feltételes várható értéket, ami Δ Bernoulli-eloszlása miatt a $\mathbb{P}(\Delta = 1 | Y = y_i)$ feltételes valószínűséggel egyezik meg és $\pi_i^{(m+1)}$ -el jelöljük ($i = 1, \dots, n$). Mindezt a hiányos adatrendszer és a paraméter kezdeti eloszlása alapján tesszük a Bayes-tétel folytonos eloszlásokra adaptált verziója segítségével:

$$\pi_i^{(m+1)} = \frac{\pi^{(m)} f_2^{(m)}(y_i)}{(1 - \pi^{(m)}) f_1^{(m)}(y_i) + \pi^{(m)} f_2^{(m)}(y_i)} \quad (i = 1, \dots, n), \quad (2.18)$$

ahol $f_j^{(m)}$ jelöli a $\underline{\theta}^{(m)}$ paraméter alapján számolt j -edik Gauss-sűrűséget ($j = 1, 2$):

$$f_j^{(m)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_j^{(m)}} e^{-\frac{(x - \mu_j^{(m)})^2}{2(\sigma_j^{(m)})^2}}.$$

2. M-lépés: külön-külön maximalizáljuk a teljes mintát jelentő kétféle Gauss likelihoodot, aminek megoldása jól ismert, csak itt a mintaelemeket részesedésük arányában számítjuk be a kétféle becslésbe:

$$\mu_1^{(m+1)} = \frac{\sum_{i=1}^n (1 - \pi_i^{(m+1)}) y_i}{\sum_{i=1}^n (1 - \pi_i^{(m+1)})},$$

$$\sigma_1^{2(m+1)} = \frac{\sum_{i=1}^n (1 - \pi_i^{(m+1)}) (y_i - \mu_1^{(m+1)})^2}{\sum_{i=1}^n (1 - \pi_i^{(m+1)})} \quad (i = 1, \dots, n),$$

illetve

$$\begin{aligned} \mu_2^{(m+1)} &= \frac{\sum_{i=1}^n \pi_i^{(m+1)} y_i}{\sum_{i=1}^n \pi_i^{(m+1)}}, \\ \sigma_2^{2(m+1)} &= \frac{\sum_{i=1}^n \pi_i^{(m+1)} (y_i - \mu_2^{(m+1)})^2}{\sum_{i=1}^n \pi_i^{(m+1)}} \quad (i = 1, \dots, n). \end{aligned}$$

A fenti E-M lépés egy iterációs lépést jelentett. Ezután legyen

$$\pi^{(m+1)} := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \pi_i^{(m+1)}$$

a Bernoulli-paraméter első iterációs becslése a mintaátlagával, $m := m + 1$ és ismételjük meg a fenti 1. és 2. lépést. Elég sokszor ismételve az eljárásbeli $\underline{\theta}^{(m)}$ sorozat ($m = 1, 2, \dots$) konvergálni fog, hacsak valami rossz indítás miatt nem ragad le rögtön az elején (pl. a két normális paramétere megegyeznek és 1/2–1/2 eséllyel választjuk őket). Könnyű elképzelni, hogyan bonthatnánk fel mintánkat kettőnél több, de adott számú normális eloszlás keverékére (általában annyira, ahány „púpú” az empirikus sűrűséghistogram).

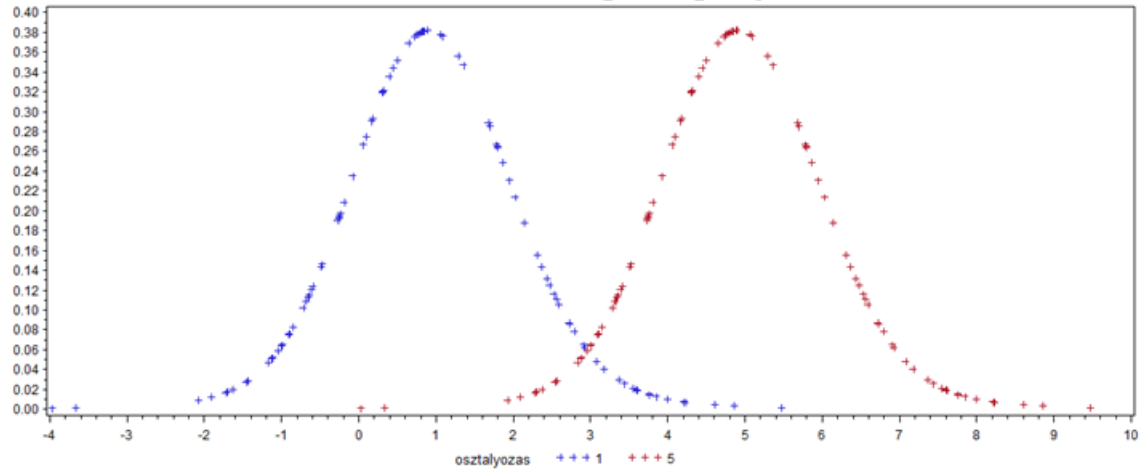
Végezetül a pontok osztályozhatók az algoritmus paramétere alapján: az i . pontot az első osztályba soroljuk, ha $\pi_i < 0.5$, és a másodikba, ha $\pi_i \geq 0.5$, ahol π_i a (2.18)-beli érték, amit az utolsó iterációban kapunk ($i = 1, \dots, n$).

1. Példa Generálunk véletlen számokból 100-100 elemű normális eloszlású mintát, melyeknek várható értékei és szórásai rendre:

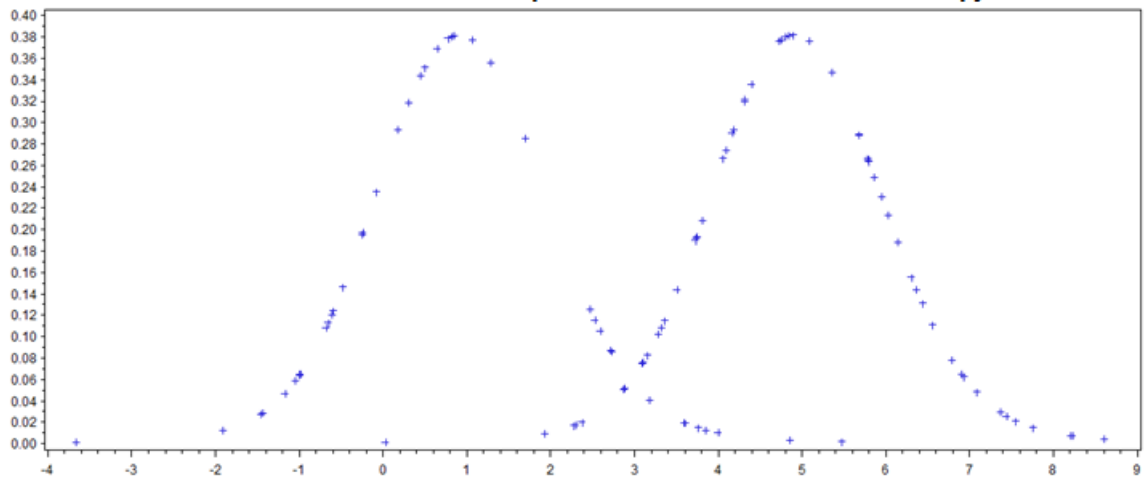
$$\mu_1 = 1, \sigma_1 = 2,$$

$$\mu_2 = 5, \sigma_2 = 2.$$

A két minta sűrűséghistogramja

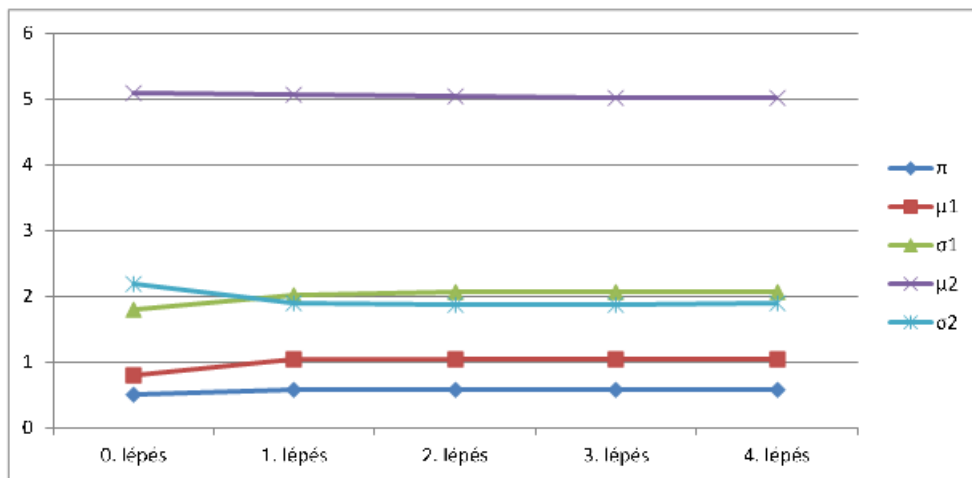


Keverék a két eloszlásból 0.6 paraméterű Bernoulli-eloszlás alapján

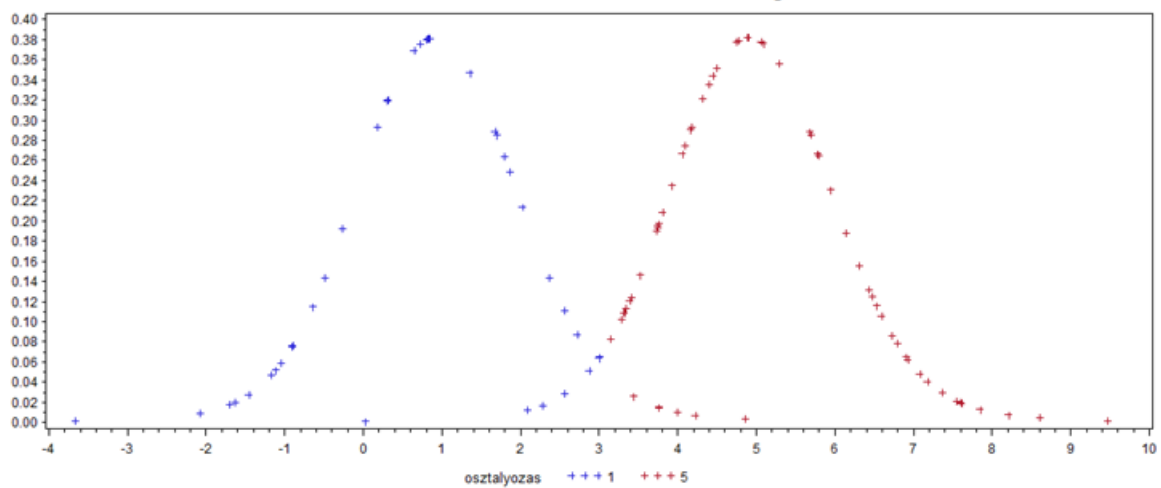


Az iteráció lépései konvergenciáig

	0. lépés	1. lépés	2. lépés	3. lépés	4. lépés
π	0,5000	0,58	0,59	0,59	0,59
μ_1	0,8000	1,05	1,05	1,04	1,04
σ_1	1,8000	2,01	2,07	2,08	2,08
μ_2	5,1000	5,07	5,05	5,03	5,02
σ_2	2,2000	1,9	1,88	1,88	1,89



Keverékfelbontás eredménye

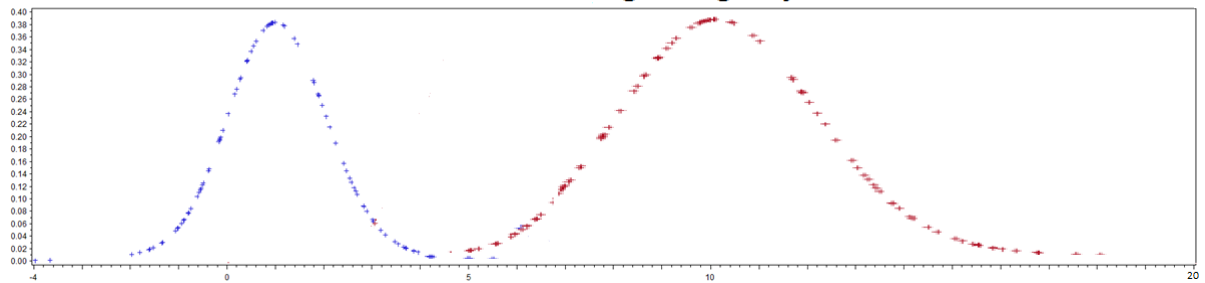


2. Példa Generálunk véletlen számokból 100-100 elemű normális eloszlású mintát, melyeknek várható értékei és szórásai rendre:

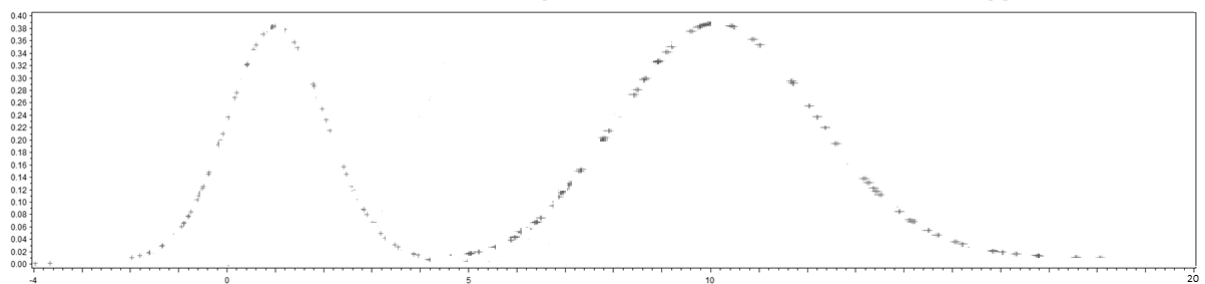
$$\mu_1 = 1, \sigma_1 = 2,$$

$$\mu_2 = 10, \sigma_2 = 4.$$

A két minta sűrűséghistogramja

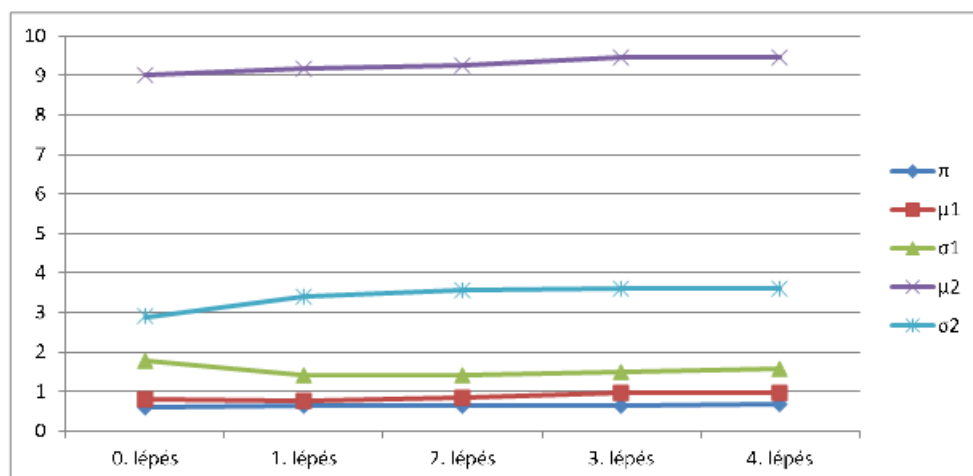


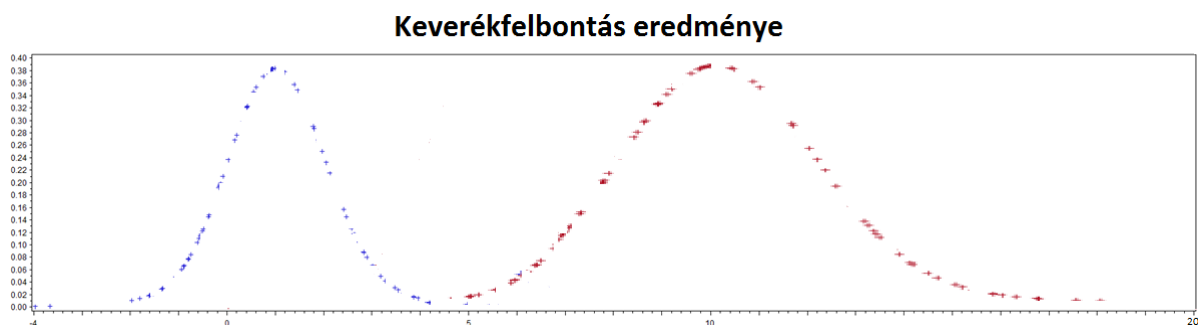
Keverék a két eloszlásból 0.6 paraméterű Bernoulli-eloszlás alapján



Az iteráció lépései konvergenciáig

	0. lépés	1. lépés	2. lépés	3. lépés	4. lépés
π	0,6000	0,63	0,65	0,66	0,67
μ_1	0,8000	0,77	0,84	0,96	0,96
σ_1	1,8000	1,41	1,43	1,51	1,57
μ_2	9,0000	9,17	9,25	9,48	9,48
σ_2	2,9000	3,4	3,58	3,63	3,63





A példák, webes felületen is megtekinthetők.

<http://calculus.hu/autograph/em.html>

2.3.2. EM-algoritmus polinomiális eloszlások keverékelbontására

Megfigyeléseink itt két véges halmaz elempárjaira vonatkoznak. Kis módosítással a [7]-beli algoritmust ismertetem, melyet ott látens osztályozási modellnek vagy kollaboratív filterezésnek (együttes szűresnek) neveznek. A hiányos mintatér $X \times Y$, ahol $X = \{x_1, \dots, x_n\}$, $Y = \{y_1, \dots, y_m\}$ és az x_i, y_j párokra együttes megfigyeléseink vannak egy $n \times m$ -es kontingenciatábla formájában, melynek elemei $\nu(x_i, y_j)$, ezek nem-negatív (nem feltétlenül, de általában) egész számok. Pl. szemszín – hajszín esetén $\nu(x_i, y_j)$ az x_i -vel kódolt szem- és y_j -vel kódolt hajszínű emberek gyakorisága a mintában; mozibajárók – mozifilmek esetén $\nu(x_i, y_j)$ azt jelöli, hogy x_i néző hányszor látta az y_j filmet (gyakran 0 vagy 1); internetes adatoknál kulcsszó – dokumentum, felhasználó – dokumentum; banki adatoknál banki rendszerbe való fizikai belépés id.-je – accountra való belépés id.-je; pénzforgalmi adatoknál lehetséges átutalók – lehetséges kedvezményezettek. Utóbbi esetben $\nu(x_i, y_j)$ jelöli az x_i által y_j -nek átutalt összeg nagyságát (pl. ezer Ft-ban) vagy az $x_i \rightarrow y_j$ tranzakció gyakoriságát egy adott időszakban. Itt $X = Y$ a bank összes ügyfele, de a kontingenciatábla általában ekkor sem szimmetrikus.

Tehát a kontingenciatábla adott, azonban a $\nu(x_i, y_j)$ számok rendszerét hiányos adatrendszernek tekintjük, mert nem tartalmazza a kapcsolat/tranzakció mögötti szándékot, melyet látens változónak tekintünk. Ez egy diszkrét háttérváltozó a $Z = \{z_1, \dots, z_k\}$ értékkészlettel, k rögzített és jóval kisebb, mint n vagy m . A szemszín – hajszín példában adatrendszerünk lehet különböző típusú országok adatainak keveréke (pl. skandináv, közép-európai, mediterrán); mozibajárók – mozifilmek esetén a látens változó a filmnézés ill. filmek különböző fajtáit jelölheti: pl. művész-, dokumentum-, kommersz filmek ill. ilyen filmekre orientált nézők (maguk a nézők ill. filmek sem egységesek, bizonyos arányban tartalmazzák ezeket az orientációkat); a pénzforgalmi példában látens változó lehet az átutalás szándéka (pl. családi, üzleti vagy pénzmosás, ekkor $k = 3$). Célunk az, hogy

ezen szándékok szerint szabdaljuk fel az egyes átutalásokat és kiszűrjük a gyanús szándékokhoz leginkább köthető x_i, y_j párokat. A [7] cikk példájában filmnézési szokásokat vizsgálunk.

Modellünk a következő:

$$p(x_i, y_j) = \sum_{l=1}^k p(x_i, y_j | z_l) \cdot \pi(z_l) = \sum_{l=1}^k p(x_i | z_l) \cdot p(y_j | z_l) \cdot \pi(z_l),$$

ahol a pénzforgalmi példával élve $p(x_i, y_j)$ jelöli az $x_i \rightarrow y_j$ átutalás valószínűségét, $\pi(z_l)$ a z_l szándék a priori valószínűségét, és feltesszük, hogy adott szándék mellett $p(x_i, y_j | z_l) = p(x_i | z_l) \cdot p(y_j | z_l)$, ami a két irányú pénzforgalom adott szándék melletti feltételes függetlenségét jelenti.

A modell paraméterei a $\pi(z_l)$ valószínűségek ($l = 1, \dots, k$) és a $p(x_i | z_l)$, $p(y_j | z_l)$ feltételes valószínűségek ($i = 1 \dots, n$; $j = 1, \dots, m$; $l = 1, \dots, k$). Ezeket $\underline{\theta}$ -ban fogjuk össze. Célunk a következő hiányos likelihood maximalizálása, mely polinomiális eloszlások keveréke:

$$\sum_{l=1}^k \pi(z_l) \cdot c_l \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m p(x_i, y_j | z_l)^{\nu(x_i, y_j | z_l)},$$

ahol a feltételes cellavalószínűségek (melyek a modell szerint szorzat alakúak) kitevőjében a cellagyakoriságok adott szándék melletti értéke áll (nem feltétlenül egész számok), c_l pedig csak l -től függő konstans (polinomiális együttható, vagy nem egész kitevők esetén Γ -függvényeket tartalmaz).

Becsüljük a paramétereket az EM-algoritmus segítségével!

0. Inicializálás. A paraméterekhez kezdőértéket rendelünk: $\pi^{(0)}(z_l)$, $p^{(0)}(x_i | z_l)$, $p^{(0)}(y_j | z_l)$. $t:=0$, tegyük fel, hogy már kezünkben van a $\underline{\theta}^{(t)}$ iterált.

1. E-lépés: kiszámoljuk a hiányzó szándék feltételes várható értékét a hiányos adatrendszer alapján. Ezt a következő feltételes (a posteriori) valószínűségek rendszere definiálja a Bayes-tétellel:

$$p^{(t+1)}(z_l | x_i, y_j) = \frac{p^{(t)}(x_i, y_j | z_l) \cdot \pi^{(t)}(z_l)}{\sum_{l'=1}^k p^{(t)}(x_i, y_j | z_{l'}) \cdot \pi^{(t)}(z_{l'})} = \frac{p^{(t)}(x_i | z_l) \cdot p^{(t)}(y_j | z_l) \cdot \pi^{(t)}(z_l)}{\sum_{l'=1}^k p^{(t)}(x_i | z_{l'}) p^{(t)}(y_j | z_{l'}) \cdot \pi^{(t)}(z_{l'})}.$$

2. M-lépés: külön-külön maximalizáljuk a k db. polinomiális eloszlás paramétereit, azaz rögzített l esetén keressük a

$$c_l \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m p(x_i, y_j | z_l)^{\frac{\nu(x_i, y_j) \cdot p^{(t+1)}(z_l | x_i, y_j)}{h_l}}$$

függvény maximumát, ahol a feltételes cellavalószínűségek kitevőjében a cellagyakoriságok adott szándék melletti értéke áll (Bayes-tétel a gyakoriságokra), a nevezőben álló h_l

csak l -től függ (a számlálóbeli i, j -re vett összege). A feltételes függetlenséget kihasználva és átrendezve maximalizálni akarjuk a

$$c_l \left[\prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{p(x_i|z_l) \cdot p(y_j|z_l)\}^{\nu(x_i, y_j) \cdot p^{(t+1)}(z_l|x_i, y_j)} \right]^{\frac{1}{h_l}}$$

kifejezést a $p(x_i|z_l)$, $p(y_j|z_l)$ paraméterekben. Rögzített l -re ($l = 1, \dots, k$) elég a szögletes zárójelben álló speciális polinomiális likelihood maximumát venni. A specialitás abban áll, hogy a kapcsos zárójelbe foglalt valószínűségek szorzat alakúak és a kitevőbei csonkolt gyakoriságokkal dolgozunk (Bayes-tétel megfelelője a gyakoriságokra). Átrendezve és ismerve a klasszikus polinomiális likelihood maximumát, a paraméterekre a következő becslés adódik minden $l = 1, \dots, k$ esetén:

$$p^{(t+1)}(x_i|z_l) = \frac{\sum_{j=1}^m \nu(x_i, y_j) \cdot p^{(t+1)}(z_l|x_i, y_j)}{\sum_{i'=1}^n \sum_{j=1}^m \nu(x_{i'}, y_j) \cdot p^{(t+1)}(z_l|x_{i'}, y_j)} \quad (i = 1, \dots, n)$$

illetve

$$p^{(t+1)}(y_j|z_l) = \frac{\sum_{i=1}^n \nu(x_i, y_j) \cdot p^{(t+1)}(z_l|x_i, y_j)}{\sum_{i=1}^n \sum_{j'=1}^m \nu(x_i, y_{j'}) \cdot p^{(t+1)}(z_l|x_i, y_{j'})} \quad (j = 1, \dots, m).$$

Ezután legyen

$$\pi^{(t+1)}(z_l) := \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m p^{(t+1)}(z_l|x_i, y_j)}{nm} \quad (l = 1, \dots, k)$$

a szándékok valószínűségének következő iterációs becslése, $t := t + 1$ és újra megteesszük az 1. – 2. lépést. Ezt elég sokszor ismételve a $\underline{\theta}^{(t)}$ sorozat konvergálni fog $\underline{\theta}^*$ -hoz bármely értelmes kezdés esetén. (Értelmetlen kezdés, ha az a priori valószínűségeket egyenlőnek választjuk. Ekkor az első lépésben a marginális valószínűségeket kapjuk, s ezeknél az iteráció le is ragad.)

Ezekután – pl. a pénzforgalmi példával élve – ha valamely l -re $\pi^*(z_l)$ „kicsi”, de a $p^*(x_i|z_l)$, $p^*(y_j|z_l)$ feltételes valószínűségek közt vannak szignifikánsan „nagyok”, akkor ezek az x_i, y_j párok „gyanúsak”, akár csak a hozzájuk tartozó z_l szándék.

2.3.3. EM-algoritmus gráfok klaszterezésére

Most a statisztikai minta egy n csúcson értelmezett egyszerű gráf $n \times n$ -es, szimmetrikus szomszédsági mátrixa. Jelölje ezt $\mathbf{A} = (a_{ij})$, ahol $a_{ij} = 1$, ha $i \sim j$ ($i \neq j$) és 0, különben; $a_{ii} = 0$ ($i = 1, \dots, n$). A következő, sztochasztikus blokk-modell paramétereit fogjuk becsülni (a modellt a [1] cikkben vezették be, de ott nem-paraméteres szempontból tárgyalták). A paramétereket most a [2] cikk alapján becsüljük az EM-algoritmus segítségével.

- Adott k egészre ($1 < k < n$) a csúcsok függetlenül tartoznak a V_a klaszterekbe π_a valószínűséggel, $a = 1, \dots, k$; $\sum_{a=1}^k \pi_a = 1$.
- V_a és V_b csúcsai egymástól függetlenül,

$$\mathbb{P}(i \sim j | i \in V_a, j \in V_b) = p_{ab}, \quad 1 \leq a, b \leq k$$

valószínűséggel vannak összekötve.

A modell paramétereit a $\underline{\pi} = (\pi_1, \dots, \pi_k)$ vektorba és a $k \times k$ -as, szimmetrikus $\mathbf{P} = (p_{ab})$ mátrixba foglaljuk össze. A teljes valószínűség tétele értelmében a likelihood függvény:

$$\frac{1}{2} \sum_{1 \leq a, b \leq k} \pi_a \pi_b \prod_{i \in C_a, j \in C_b, i \neq j} p_{ab}^{a_{ij}} (1 - p_{ab})^{(1 - a_{ij})} = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq a, b \leq k} \pi_a \pi_b \cdot p_{ab}^{e_{ab}} \cdot (1 - p_{ab})^{(n_{ab} - e_{ab})},$$

amely binomiális eloszlások keveréke, ahol e_{ab} jelöli a V_a és V_b klaszterket összekötő élek számát ($a \neq b$), e_{aa} pedig a tisztán V_a -beli élek számának a kétszeresét; továbbá $n_{ab} = |V_a| \cdot |V_b|$ ha $a \neq b$ és $n_{aa} = |V_a| \cdot (|V_a| - 1)$, $a = 1, \dots, k$ a lehetséges élek száma.

Itt \mathbf{A} egy hiányos adatrendszer, mivel a csúcsok klaszterbe tartozását (tagságát) nem ismerjük. Ezért az \mathbf{A} adatmátrixot a csúcsok $\Delta_1, \dots, \Delta_n$ ún. tagsági vektoraival egészítjük ki, melyek független, azonos k -dimenziós $Poly(1, \underline{\pi})$ véletlen vektorok. Még pontosabban, $\Delta_i = (\Delta_{1i}, \dots, \Delta_{ki})$, ahol $\Delta_{ai} = 1$ ha $i \in V_a$ és 0, különben. Ezért Δ_i koordinátáinak összege 1, és $\mathbb{P}(\Delta_{ai} = 1) = \pi_a$. Ezzel a fenti likelihood függvény az

$$\frac{1}{2} \sum_{1 \leq a, b \leq k} \pi_a \pi_b \cdot p_{ab}^{\sum_{i,j: i \neq j} \Delta_{ai} \Delta_{bj} a_{ij}} \cdot (1 - p_{ab})^{\sum_{i,j: i \neq j} \Delta_{ai} \Delta_{bj} (1 - a_{ij})} \quad (2.19)$$

alakot ölti, és ezt maximalizáljuk az EM-algoritmus alternáló E és M lépéseiben.

Megjegyezzük, hogy a teljes likelihood a

$$\prod_{1 \leq a, b \leq k} p_{ab}^{e_{ab}} \cdot (1 - p_{ab})^{(n_{ab} - e_{ab})} = \prod_{a=1}^k \prod_{i=1}^n \prod_{b=1}^k [p_{ab}^{\sum_{j: j \neq i} \Delta_{bj} a_{ij}} \cdot (1 - p_{ab})^{\sum_{j: j \neq i} \Delta_{bj} (1 - a_{ij})}]^{\Delta_{ai}} \quad (2.20)$$

kifejezés négyzetgyöke lenne, ami azonban csak ismert tagságok esetén alkalmazható.

A kezdő $\underline{\pi}^{(0)}$, $\mathbf{P}^{(0)}$ paraméterekből és $\Delta_1^{(0)}, \dots, \Delta_n^{(0)}$ tagsági vektorokból kiindulva, a t -edik iterációs lépés a következő ($t = 1, 2, \dots$).

E -lépés: kiszámoljuk Δ_i feltételes várható értékét a $(t-1)$ -edik lépésbeli modell paraméterek és tagságok (az $M^{(t-1)}$ -el jelölt körülmények) alapján. A Bayes-tétel értelmében, az i -edik csúcs részaránya az a -edik klaszterben:

$$\pi_{ai}^{(t)} = \mathbb{E}(\Delta_{ai} | M^{(t-1)}) = \mathbb{P}(\Delta_{ai} = 1 | M^{(t-1)}) = \frac{\mathbb{P}(M^{(t-1)} | \Delta_{ai} = 1) \cdot \pi_a^{(t-1)}}{\sum_{l=1}^k \mathbb{P}(M^{(t-1)} | \Delta_{li} = 1) \cdot \pi_l^{(t-1)}}$$

$(a = 1, \dots, k; i = 1, \dots, n)$. Látható, hogy minden i -re $\pi_{ai}^{(t)}$ a számlálóval arányos, ahol

$$\mathbb{P}(M^{(t-1)} | \Delta_{ai} = 1) = \prod_{b=1}^k (p_{ab}^{(t-1)})^{\sum_{j: j \neq i} \Delta_{bj}^{(t-1)} a_{ij}} \cdot (1 - p_{ab}^{(t-1)})^{\sum_{j: j \neq i} \Delta_{bj}^{(t-1)} (1 - a_{ij})} \quad (2.21)$$

az (2.20) likelihood i -edik csúccsal kapcsolatos része a $\Delta_{ai} = 1$ feltétel mellett.

M -lépés: az összes a, b párra külön-külön maximalizáljuk azt a likelihoodot, mely a mintaelemeket a klaszterekben való részarányukban veszi figyelembe:

$$p_{ab}^{\sum_{i,j: i \neq j} \pi_{ai}^{(t)} \pi_{bj}^{(t)} a_{ij}} \cdot (1 - p_{ab})^{\sum_{i,j: i \neq j} \pi_{ai}^{(t)} \pi_{bj}^{(t)} (1 - a_{ij})}$$

maximumhelye p_{ab} -ben a binomiális likelihood szabálya szerint:

$$p_{ab}^{(t)} = \frac{\sum_{i,j: i \neq j} \pi_{ai}^{(t)} \pi_{bj}^{(t)} a_{ij}}{\sum_{i,j: i \neq j} \pi_{ai}^{(t)} \pi_{bj}^{(t)}}, \quad 1 \leq a \leq b \leq k,$$

ahol az a és b klasztereket összekötő éleket végpontjaik részarányával szorozva vesszük figyelembe. Legyen $\mathbf{P}^{(t)} = (p_{ab}^{(t)})$ szimmetrikus mátrix.

$\underline{\pi}$ maximum likelihood becslése a t -edik lépésben a $\underline{\pi}^{(t)}$ vektor, melynek koordinátái $\pi_a^{(t)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \pi_{ai}^{(t)}$ ($a = 1, \dots, k$), míg a Δ_i tagsági vektor maximum likelihood becslését diszkrét maximalizálással kapjuk: $\Delta_{ai}^{(t)} = 1$, ha $\pi_{ai}^{(t)} = \max_{b \in \{1, \dots, k\}} \pi_{bi}^{(t)}$ és 0, különben. (Ha nem egyértelmű, akkor a kisebb indexű klasztert választjuk.) $\underline{\pi}$ ilyen választása csökkenti (2.19) értékét.

Megjegyezzük, hogy elég a tagságokat csak az iteráció végén meghatározni, és (2.21)-ben $\pi_{bj}^{(t-1)}$ -t helyettesíteni $\Delta_{bj}^{(t-1)}$ helyére, ahol $\pi_{bj}^{(0)} = \Delta_{bj}^{(0)}$.

A fenti algoritmus is a [7] cikkbeli ún. kollaboratív filterezés speciális esete, és az EM-algoritmus általános elmélete alapján konvergál, hiszen ismét exponenciális eloszlás-családban vagyunk.

Irodalomjegyzék

- [1] P. J. Bickel, A. Chen, A nonparametric view of network models and Newman-Girvan and other modularities, *PNAS* **106** (50) (2009), 21068–21073.
- [2] Bolla, M., Parametric and non-parametric approaches to recover regular graph partitions, A 14. ASMDA Konferencia kötetében (szerk. R. Manca és C. H. Skiadas), Università di Sapienza, Róma (2011), 164-171. old.
- [3] Bolla, M., Kramli A., Statisztikai következtetések elmélete. Typotex, Budapest (2005, 2012)
- [4] Csiszár, I., Shields, P., Information Theory and Statistics: A Tutorial, In: Foundations and Trends in Communications and Information Theory, Vol. 1 Issue 4 (2004), Now Publishers, USA.
- [5] Dempster, A. P., Laird, N. M., Rubin, D. B., Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm, *J. R. Statist. Soc. B* **39** (1977), 1–38.
- [6] Hastie, T., Tibshirani, R., Friedman, J., The Elements of Statistical Learning. Data Mining, Inference, and Prediction. Springer, New York (2001).
- [7] Hofmann, T., Puzicha, J., Latent class models for collaborative filtering. In *Proc. 16th International Joint Congress on Artificial Intelligence (IJCAI 99)* (ed. Dean T), Vol. 2, (1999) pp. 688-693. Morgan Kaufmann Publications Inc., San Francisco CA.
- [8] McLachlan, G. J., The EM Algorithm and Extensions. Wiley, New York (1997).
- [9] Rao, C. R., Linear Statistical Inference and Its Applications. Wiley, New York (1965, 1973).

3. fejezet

Az ACE-algoritmus általánosított regresszióra

„Akár egy halom hasított fa,
hever egymáson a világ,
szorítja, nyomja, összefogja
egyik dolog a másikat
s így mindenik determinált.”
(József Attila: *Eszmélet, IV. ciklus*)

A Breiman és Friedman által kifejlesztett algoritmus [3] az alábbiakban vázolt általános regressziós feladat numerikus megoldására szolgál igen tág keretek között (kategorikus adatokra, idősorokra ugyanúgy alkalmazható, mint olyan többváltozós adatokra, ahol a változók egy része abszolút folytonos, más része diszkrét; ilyen szituációk gyakran előfordulnak az adatbányászatban).

Az Y függő és az X_1, \dots, X_p független változóknak keresendők olyan $\Psi, \Phi_1, \dots, \Phi_p$ mérhető, nem-konstans valós értékű függvényei (szkórjai), amelyekkel

$$e^2(\Psi, \Phi_1, \dots, \Phi_p) = \mathbb{E} \left[\Psi(Y) - \sum_{j=1}^p \Phi_j(X_j) \right]^2 / \mathbf{D}^2(\Psi(Y))$$

minimális adott $\{(y_k, x_{k1}, \dots, x_{kp} : k = 1, \dots, n)\}$ adatrendszer alapján. Valójában feltételes minimumot keresünk a $\mathbf{D}^2(\Psi(Y)) = 1$ feltétel mellett.

Lineáris transzformációkkal elérhető, hogy $\mathbb{E}(\Psi(Y)) = \mathbb{E}(\Phi_1(X_1)) = \dots = \mathbb{E}(\Phi_p(X_p)) = 0$ $\mathbf{D}^2(\Psi(Y)) = 1$ legyen.

Amennyiben a változók együttes $(p + 1)$ -dimenziós eloszlása ismert, az algoritmus a következő. Legyenek $\Psi^{(0)}(Y), \Phi_1^{(0)}(X_1), \dots, \Phi_p^{(0)}(X_p)$ a feltételeknek eleget tevő kezdeti függvények. Az iteráció t -edik lépése (mindig csak egyik függvényt változtatjuk):

1. Rögzített $\Phi_1^{(t)}(X_1), \dots, \Phi_p^{(t)}(X_p)$ esetén

$$\Psi^{(t+1)}(Y) := \frac{\mathbb{E}(\sum_{j=1}^p \Phi_j^{(t)}(X_j) | Y)}{\mathbb{D}(\sum_{j=1}^p \Phi_j^{(t)}(X_j) | Y)}.$$

2. Rögzített $\Psi^{(t+1)}(Y), \Phi_1^{(t+1)}(X_1), \dots, \Phi_{i-1}^{(t+1)}(X_{i-1}), \Phi_{i+1}^{(t)}(X_{i+1}), \dots, \Phi_p^{(t)}(X_p)$ esetén

$$\Phi_i^{(t+1)}(X_i) := \mathbb{E} \left([\Psi^{(t+1)}(Y) - \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_j^{(t+1)}(X_j) - \sum_{j=i+1}^p \Phi_j^{(t)}(X_j)] | X_i \right), \quad i = 1, \dots, p.$$

Világos az algoritmus elnevezése: ACE=Alternating Conditional Expectation (felváltva történő feltételes várható érték vevés).

Ennek az iterációnak a konvergenciája helyett a szerzők ennél egy általánosabb algoritmusnak a konvergenciáját látják be (ún. dupla-ciklus iteráció: az 1. „külső” iteráció minden lépésében a 2. „belső” iterációt folytatják konvergenciáig, majd visszatérnek a külső ciklusba, amíg az is nem konvergál).

A hagyományos többváltozós regresszió lineáris kapcsolatot tételez fel a változók közt (ez többdimenziós normális háttéreloszlás esetén jogos is), ha pedig tudjuk, hogy a változók közt milyen függvénykapcsolat áll fenn, linearizáló transzformációkat alkalmazunk. Itt magukat a linearizáló transzformációkat is keressük, melyek hatása után a függő és független változók közt közel lineáris függvénykapcsolat alakul ki.

Többdimenziós adatsorok esetén az egyik változó lehet maga az idő. Ennek a változónak az optimális transzformációja azt az időtranszformációt adja, mely a leginkább összefügg a többi változó időbeni profiljával. Megjegyezzük még, hogy az ACE-algoritmusbeli sorozatos feltételes várható érték vevés rokonságot mutat a Kálmán–Bucy-féle szűrés algoritmusával.

3.1. Elméleti megfontolások

A konvergencia bizonyítása egy általános Hilbert-terek kompakt lineáris operátoraira vonatkozó tételen alapul.

Legyen (ξ, η) valós értékű valószínűségi változópár – egyikük sem konstans 1 valószínűséggel – az $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ szorzattér felett \mathbb{W} együttes és \mathbb{P}, \mathbb{Q} marginális eloszlásokkal. Tegyük fel, hogy ξ és η függősége reguláris, azaz \mathbb{W} együttes eloszlásuk abszolút folytonos a $\mathbb{P} \times \mathbb{Q}$ szorzatmértékre, és jelölje w a Radon–Nikodym deriváltat, ld. [4].

Jelölje $H = L_2(\xi)$ ill. $H' = L_2(\eta)$ ξ ill. η 0 várható értékű, véges varianciájú függvényeit a \mathbb{P} ill. \mathbb{Q} eloszlások szerint. H és H' Hilbert-terek a kovarianciával, mint skalárszorzattal és altérként beágyazhatók a szorzattér feletti L_2 -térbe.

Legyen $K : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$ magfüggvény olyan, hogy

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} K^2(x, y) \mathbb{P}(dy) \mathbb{Q}(dx) < \infty. \quad (3.1)$$

Ezzel egy $A : H' \rightarrow H$ lineáris operátor (integrál operátor) definiálható a következőképpen: a $\phi \in H'$ függvényhez A azt a $\psi \in H$ függvényt rendeli, melyre

$$\psi(x) = (A\phi)(x) = \int_{\mathcal{Y}} K(x, y) \phi(y) \mathbb{Q}(dy), \quad x \in \mathcal{X}.$$

A linearitása miatt ψ várható értéke 0, és könnyű látni, hogy varianciája véges, továbbá

$$\|\psi\| \leq \|K\| \cdot \|\phi\| < \infty,$$

ahol $\|\cdot\|$ a megfelelő térbeli L_2 -normát (szórást) jelöli. Ezért A operátornormájára:

$$\|A\| = \sup_{\|\phi\|=1} \|A\phi\| \leq \|K\|. \quad (3.2)$$

A fenti L_2 -terek szeparábilis Hilbert-terek, és (3.1) miatt A Hilbert–Schmidt operátor, így kompakt (teljesen folytonos) is. Ezért létezik a következő szinguláris érték felbontása:

$$A = \sum_{i=1}^{\infty} s_i \langle \cdot, \phi_i \rangle_{H'} \psi_i,$$

ahol $\langle \cdot, \cdot \rangle$ jelöli a megfelelő Hilbert-térbeli skaláris szorzatot (kovarianciát), $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq 0$ valós szinguláris értékek, melyek egyetlen lehetséges torlódási pontja a 0; a ψ_i, ϕ_i függvénypárok pedig megválaszthatók úgy, hogy $\{\psi_i\}_{i=1}^{\infty} \subset H$ és $\{\phi_i\}_{i=1}^{\infty} \subset H'$ teljes ortonormált rendszer legyen. Ennél kicsit több is igaz:

$$\sum_{i=1}^{\infty} s_i^2 = \|K\|_2^2 < \infty,$$

ami maga után vonja, hogy $\lim_{i \rightarrow \infty} s_i = 0$. A adjungáltja (valóban transzponáltja):

$$A^T = \sum_{i=1}^{\infty} s_i \langle \cdot, \psi_i \rangle_H \phi_i,$$

és

$$A\phi_i = s_i \psi_i, \quad A^T \psi_i = s_i \phi_i, \quad i = 1, 2, \dots,$$

továbbá s_1 A és A^T spektrálnormája.

A szimmetrikus esetben $w(x, y) = w(y, x)$, $x \in \mathcal{X}$, $y \in \mathcal{Y}$. Ekkor ξ és η azonos eloszlásúak (de nem függetlenek, hiszen együttes eloszlásuk \mathbb{W}), ezért H és H' izomorf abban az erősebb értelemben is, hogy tetszőleges $\psi \in H$ val. változóhoz van olyan $\psi' \in H'$ val. változó és megfordítva, hogy ψ és ψ' azonos eloszlásúak. A Hilbert–Schmidt tétel [5] értelmében a $A : H' \rightarrow H$ önadjungált (valóban szimmetrikus) kompakt lineáris operátor spektrálfelbontása

$$A = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \langle \cdot, \psi'_i \rangle_{H'} \psi_i$$

valós sajátértékekkel, melyek egyetlen lehetséges torlódási pontja 0, és a ψ_1, ψ_2, \dots sajátfüggvények olyanok, hogy ψ_i és ψ'_i azonos eloszlásúak \mathbb{W} együttes eloszlással. (A szinguláris értékei a sajátértékek abszolút értékei, és a Hilbert-Schmidt tulajdonságból a kompaktság következik.)

Ha a magfüggvény maga w , akkor a feltételes várható érték képzés operátorát kapjuk:

$$P_{\mathcal{X}} : H' \rightarrow H, \quad \psi = P_{\mathcal{X}}\phi = \mathbb{E}(\phi | \xi), \quad \psi(x) = \int_{\mathcal{Y}} w(x, y)\phi(y) \mathbb{Q}(dy)$$

és

$$P_{\mathcal{Y}} : H \rightarrow H', \quad \phi = P_{\mathcal{Y}}\psi = \mathbb{E}(\psi | \eta), \quad \phi(y) = \int_{\mathcal{X}} w(x, y)\psi(x) \mathbb{P}(dx).$$

Nyilván $P_{\mathcal{X}}^T = P_{\mathcal{Y}}$ és megfordítva, hiszen

$$\langle P_{\mathcal{X}}\phi, \psi \rangle_H = \langle P_{\mathcal{Y}}\psi, \phi \rangle_{H'} = \text{Cov}_{\mathbb{W}}(\psi, \phi), \quad (3.3)$$

ahol a $\text{Cov}_{\mathbb{W}}$ kovarianciafüggvény olyan, hogy

$$\text{Cov}_{\mathbb{W}}(\psi, \phi) = \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} \psi(x)\phi(y) \mathbb{W}(dx dy) = \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} \psi(x)\phi(y)w(x, y)\mathbb{Q}(dy)\mathbb{P}(dx).$$

Tegyük fel, hogy

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} w^2(x, y)\mathbb{Q}(dy)\mathbb{P}(dx) < \infty. \quad (3.4)$$

Diszkrét $\{w_{ij}\}$ eloszlás és $\{p_i\}$ ($p_i = \sum_j w_{ij}$), $\{q_j\}$ ($q_j = \sum_i w_{ij}$) marginálisok esetén (3.4) jelentése:

$$\sum_{i \in \mathcal{X}} \sum_{j \in \mathcal{Y}} \left(\frac{w_{ij}}{p_i q_j} \right)^2 p_i q_j = \sum_{i \in \mathcal{X}} \sum_{j \in \mathcal{Y}} \frac{w_{ij}^2}{p_i q_j} < \infty,$$

míg abszolút folytonos eloszlás esetén, ha $f(x, y)$ az együttes, $f_1(x)$ ($f_1(x) = \int f(x, y) dy$) és $f_2(y)$ ($f_2(y) = \int f(x, y) dx$) a marginális sűrűségfüggvény, akkor (3.4) jelentése:

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} \left(\frac{f(x, y)}{f_1(x)f_2(y)} \right)^2 f_1(x)f_2(y) dx dy = \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} \frac{f^2(x, y)}{f_1(x)f_2(y)} dx dy < \infty.$$

Ilyen feltételek mellett $P_{\mathcal{X}}$ és $P_{\mathcal{Y}}$ Hilbert–Schmidt operátorok, kompaktak, és szinguláris értékfelbontásuk (a továbbiakban SVD):

$$P_{\mathcal{X}} = \sum_{i=1}^{\infty} s_i \langle \cdot, \phi_i \rangle_{H'} \psi_i, \quad P_{\mathcal{Y}} = \sum_{i=1}^{\infty} s_i \langle \cdot, \psi_i \rangle_H \phi_i, \quad (3.5)$$

ahol $1 \geq s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq 0$, hiszen $P_{\mathcal{X}}$ and $P_{\mathcal{Y}}$ megszorított ortogonális vetítések egyik marginálisról (nem az egész térről) a másikra. $P_{\mathcal{X}}$ a H' -beli konstans 1 valószínűségi változót a H -beli konstans 1-be viszi, de ezeket nem tekintjük függvény párnak 1 szinguláris értékkel, mivel nem 0 várható értékűek. Ezeért 1-et le kell vonni a magból. A

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} [w(x, y) - 1]^2 \mathbb{Q}(dy) \mathbb{P}(dx) = \sum_{i=1}^{\infty} s_i^2 < \infty$$

mennyiséget Rényi *négyzetes kontingenciának* nevezte.

Speciálisan, ha \mathbb{W} szimmetrikus (H és H' izomorf), akkor (3.3) miatt $P_{\mathcal{X}} = P_{\mathcal{Y}}$ önadjungált:

$$\langle P_{\mathcal{X}} \phi, \psi \rangle_H = \text{Cov}_{\mathbb{W}}(\phi, \psi) = \text{Cov}_{\mathbb{W}}(\psi, \phi) = \langle P_{\mathcal{Y}} \psi, \phi \rangle_{H'}.$$

$P_{\mathcal{X}} : H' \rightarrow H$ spektrálfelbontása:

$$P_{\mathcal{X}} = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \langle \cdot, \psi'_i \rangle_{H'} \psi_i,$$

ahol $|\lambda_i| \leq 1$ és

$$P_{\mathcal{X}} \psi'_i = \lambda_i \psi_i,$$

ahol ψ_i és ψ'_i azonos eloszlásúak.

A Rényi által is vizsgált *maximálkorreláció* feladata a következő: keresendő $\psi \in H$, $\phi \in H'$ úgy, hogy korrelációjuk a \mathbb{W} együttes eloszlás szerint maximális legyen. Kompakt operátorokra vonatkozó szeparációs tételek miatt

$$\max_{\|\psi\|=\|\phi\|=1} \text{Cov}_{\mathbb{W}}(\psi, \phi) = s_1$$

és elérik a ψ_1, ϕ_1 páron.

Ekvivalens feladat:

$$\min_{\|\psi\|=\|\phi\|=1} \|\psi - \phi\|^2 = \min_{\|\psi\|=\|\phi\|=1} (\|\psi\|^2 + \|\phi\|^2 - 2\text{Cov}_{\mathbb{W}}(\psi, \phi)) = 2(1 - s_1).$$

Tudjuk, hogy rögzített $\Psi \in H$ esetén az $\mathbb{E}(\Psi - \Phi)^2$ együttes eloszlás szerinti várható értéket a $\Phi \in H'$ valószínűségi változók körében a $\Phi = \mathbb{E}(\Psi|\eta)$ feltételes várható érték minimalizálja. Még általánosabban, keressük azt a $\Psi \in H$, $\Phi \in H'$ változó párt, melyre

$\mathbb{E}(\Psi - \Phi)^2$ minimális a $\mathbf{D}^2(\Psi) = 1$ kényszerfeltétel mellett. A $\hat{\Phi} = \Phi/\mathbf{D}(\Phi)$ jelöléssel $\mathbb{E}(\Psi - \Phi)^2 = 1 - 2\mathbb{E}(\Psi\Phi) + \mathbb{E}(\Phi^2) = 1 - 2\mathbb{E}(\Psi\hat{\Phi})\mathbf{D}(\Phi) + \mathbf{D}^2(\Phi) = 1 - 2\langle P_Y\Psi, \hat{\Phi} \rangle \|\Phi\| + \|\Phi\|^2$ aminél nem nagyobb az

$$1 - 2\langle P_Y\Psi_1, \Phi_1 \rangle \|\Phi\| + \|\Phi\|^2 = 1 - 2s_1\|\Phi\| + \|\Phi\|^2$$

kifejezés, ahol használtuk a feltételes várható érték vevés operátorának optimumtulajdonságát. Az $1 - 2s_1\|\Phi\| + \|\Phi\|^2$ kifejezés viszont akkor minimális, ha $\|\Phi\| = s_1$.

Az általános regressziós feladat minimumát tehát a $\Psi_1, s_1\Phi_1 = P_Y\Psi_1$ pár adja. A Ψ_1, Φ_1 pár egyben a maximálkorrelációs feladatnak is megoldása 2 változó esetén. Ezt [4]-ben Rényi bizonyította a maximálkorreláció egyéb jó tulajdonságaival együtt. Két (esetünkben H - ill. H' -beli) valószínűségi változó maximálkorrelációja nem más, mint a mérhető függvényeik közt fellépő lehető legnagyobb korreláció. Ez egy $[0,1]$ -beli szám, pontosan akkor 0, ha a változók függetlenek, és 1, ha az egyik változó valamely mérhető függvénye a másik változó mérhető függvényével 1 valószínűséggel megegyezik. Jelen esetben tehát az $\mathbb{E}(\Psi - \Phi)^2$ célfüggvény minimuma a $\mathbf{D}^2(\Psi) = 1$ kényszerfeltétel mellett kifejezhető az s_1 maximálkorrelációval: $1 - 2s_1s_1 + s_1^2 = 1 - s_1^2$.

Két változó ($p = 1$ esetén) az ACE-algoritmus konvergenciája közvetlenül adódik a következő tételből.

3.1. Tétel *A fenti jelölésekkel legyen E az $A : H \rightarrow H'$ kompakt lineáris operátor legnagyobb (s_1) szinguláris értékéhez tartozó H -beli izotróp altér, azaz az A operátor s_1 szinguláris értékéhez tartozó jobb oldali (H -beli) sajátfüggvényeii által kifeszített altér. Ekkor tetszőleges olyan $\Psi^{(0)} \in H$ elemből kiindulva, melyre $\|\Psi^{(0)}\| = 1$ és amely nem merőleges E -re, az alábbi iteráció konvergens:*

$$\Phi^{(m+1)} := A\Psi^{(m)}, \quad \Psi^{(m+1)} := A^*\Phi^{(m+1)} / \|A^*\Phi^{(m+1)}\|, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

A határértéket is megadjuk. Legyen

$$\Psi^* = P_E\Psi^{(0)} / \|P_E\Psi^{(0)}\|, \quad \Phi^* = A\Psi^*,$$

ahol P_E jelenti az E altérre való vetítést. Ekkor

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \|\Psi^{(m)} - \Psi^*\| = 0, \quad \lim_{m \rightarrow \infty} \|\Phi^{(m)} - \Phi^*\| = 0, \quad \lim_{m \rightarrow \infty} \|\Phi^{(m)}\| = s_1.$$

Bizonyítás: A tételt az n -dimenziós esetre bizonyítjuk. Tegyük fel, hogy $\dim E = r \leq$ az A operátor jobboldali sajátbázisában (ami ugyanaz, mint az A^*A operátor sajátbázisa) felírva. Legyenek ψ_1, \dots, ψ_n a $\Psi^{(0)}$ vektor koordinátái az A operátor jobboldali sajátbázisában (ami ugyanaz, mint az A^*A operátor sajátbázisa) felírva. Ekkor $P_E\Psi^{(0)} = \sum_{i=1}^r \psi_i\Psi_i$, és az ACE algoritmus definíciója szerint

$$\Psi^{(m)} = \frac{(A^*A)^m\Psi^{(0)}}{\|(A^*A)^m\Psi^{(0)}\|} = \frac{s_1^{2m}\psi_1\Psi_1 + \dots + s_n^{2m}\psi_n\Psi_n}{\|s_1^{2m}\psi_1\Psi_1 + \dots + s_n^{2m}\psi_n\Psi_n\|}.$$

Felhasználtuk, hogy az A^*A lineáris operátor önadjungált s_1^2, \dots, s_n^2 sajátértékekkel és Ψ_1, \dots, Ψ_n sajátvektorokkal; a lépésenkénti normálást pedig az m -edik lépés végén egyetlen normálással helyettesítettük. Azért kell elég gyakran normálni, hogy az eljárás numerikusan stabil legyen.

Mivel a Ψ_1, \dots, Ψ_n jobb oldali sajátbázis ortonormált, $\|\sum_{i=1}^n s_i^{2m} \psi_i \Psi_i\|^2 = \sum_{i=1}^n s_i^{4m} \psi_i^2$. De $s_1 = \dots = s_r > s_{r+1} \geq \dots \geq s_n$, tehát $s_1^{2m} = \dots = s_r^{2m} >> s_{r+1}^{2m} \geq \dots \geq s_n^{2m}$, ha m elég nagy, ezért

$$\Psi^{(m)} = \frac{s_1^{2m} \psi_1 \Psi_1 + \dots + s_n^{2m} \psi_n \Psi_n}{\sqrt{\sum_{i=1}^n s_i^{4m} \psi_i^2}} = \frac{\sum_{i=1}^r \psi_i \Psi_i + \sum_{j=r+1}^n \frac{s_j^{2m}}{s_1^{2m}} \psi_j \Psi_j}{\sqrt{\sum_{i=1}^r \psi_i^2 + \sum_{j=r+1}^n \frac{s_j^{4m}}{s_1^{4m}} \psi_j^2}}.$$

Azonban

$$\Psi^* = \frac{P_E \Psi^{(0)}}{\|P_E \Psi^{(0)}\|} = \frac{\sum_{i=1}^r \psi_i \Psi_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^r \psi_i^2}},$$

így a $\Psi^{(m)}$ sorozat gyenge konvergenciája ebből kisebb átalakításokkal már adódik:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \|\Psi^{(m)} - \Psi^*\| = 0.$$

Ebből viszont a $\Phi^{(m)}$ sorozat gyenge konvergenciája is következik:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \|\Phi^{(m)} - \Phi^*\| = \|A\Psi^{(m)} - A\Psi^*\| \leq \|A\| \cdot \|\Psi^{(m)} - \Psi^*\|, \quad (3.6)$$

amely szintén 0-hoz konvergál, hiszen az A kompakt lineáris operátor korlátos.

A bal- és jobboldali szinguláris vektorok közti összefüggés alapján (l. [2]) $A\Psi^* = s_1 \Phi^* / \|\Phi^*\|$, másrészt viszont $A\Psi^* = \Phi^*$ így $\|\Phi^*\| = s_1$ és (3.6) alapján $\lim_{m \rightarrow \infty} \|\Phi^{(m)}\| = s_1$ is teljesül. Ezzel a bizonyítást befejeztük.

A precíz bizonyítás [1]-ben és [3]-ban is megtalálható. Megjegyezzük, hogy ennek az eljárásnak speciális esete a mátrixok legnagyobb sajátértékének és a hozzá tartozó sajátirányának a meghatározására alkalmazott hatványiteráció módszere.

3.2. ACE-algoritmus egymásba ágyazott ciklusokkal

Több változó esetén tekintsük a

$$H_2(Y) = \{\Psi(Y) : \mathbb{E}\Psi(Y) = 0, \quad \mathbf{D}^2\Psi(Y) < \infty\}$$

ill. a

$$H_2(X_j) = \{\Phi_j(X_j) : \mathbb{E}\Phi_j(X_j) = 0, \quad \mathbf{D}^2\Phi_j(X_j) < \infty\}, \quad j = 1, \dots, p$$

Hilbert tereket és tegyük fel, hogy a $H_2(Y)$ -ra vetítő P_0 ill. a $H_2(X_j)$ -re vetítő P_j ($j = 1, \dots, p$) feltételes várható érték vevés operátorai kompaktak.

Ezekkel az ún. dupla ciklusú algoritmus a következőképpen néz ki.

1. *Külső ciklus:* Induljunk ki a $\Psi^{(0)}$ kezdőértékből, pl. $\Psi^{(0)} := Y/\|Y\|$. $t := 0$, s belépünk a belső ciklusba.
2. *Belső ciklus:* Induljunk ki tetszőleges $\Phi_1^{(0)}, \dots, \Phi_p^{(0)}$ kezdőértékből, pl. $\Phi_j^{(0)} := X_j$, de akár 0 is lehet ($j = 1, \dots, p$). Ha már az m -edik $\Phi_1^{(m)}, \dots, \Phi_p^{(m)}$ iterált megvan, legyen

$$\Phi_j^{(m+1)} := P_j(\Psi^{(t)} - \sum_{i < j} \Phi_i^{(m+1)} - \sum_{i > j} \Phi_i^{(m)}), \quad j = 1, \dots, p; \quad m = 0, \dots$$

amíg csak a Φ_j sorozatok nem konvergálnak. Jelölje Φ_j^* a végső függvényeket ($j = 1, \dots, p$), majd ezekkel visszatérünk a külső ciklusba:

$$\Psi^{(t+1)} := P_0\left(\sum_{j=1}^p \Phi_j^*\right) / \left\|P_0\left(\sum_{j=1}^p \Phi_j^*\right)\right\|.$$

Ezután $t := t + 1$, s újra lefuttatjuk a belső ciklust, amit újraindíthatunk akár az eredeti, akár a Φ_j^* kezdőértékekkel. A külső ciklus konvergálni fog a Ψ^* függvényhez.

A $\tilde{\Phi} = \sum_{j=1}^p \Phi_j$ jelöléssel a t -edik külső ciklus m -edik belső iterációja a

$$\Psi^{(t)} - \tilde{\Phi}^{(m+1)} = (I - P_p) \dots (I - P_2)(I - P_1)(\Psi^{(t)} - \tilde{\Phi}^{(m)}) = T(\Psi^{(t)} - \tilde{\Phi}^{(m)}) \quad (3.7)$$

összefüggéssel írható le. Ez onnan is látható, hogy pl. az első lépésben

$$(I - P_1)(\Psi^{(t)} - \tilde{\Phi}^{(m)}) = \Psi^{(t)} - \sum_{j \neq 1} \Phi_j^{(m)} - P_1(\Psi^{(t)} - \sum_{j \neq 1} \Phi_j^{(m)}) = \Psi^{(t)} - \sum_{j \neq 1} \Phi_j^{(m)} - \Phi_1^{(m+1)},$$

ahol kihasználtuk, hogy $P_1\Phi_1 = \Phi_1$. Az i -edik lépés után

$$(I - P_i) \dots (I - P_1)(\Psi^{(t)} - \tilde{\Phi}^{(m)}) = \Psi^{(t)} - \sum_{j > i} \Phi_j^{(m)} - \sum_{j \leq i} \Phi_j^{(m+1)}, \quad i = 1, \dots, p,$$

így $(I - P_j)$ -k egymás utáni alkalmazása során kialakul a (3.7)-beli állapot. Innen

$$\Psi^{(t)} - \tilde{\Phi}^{(m+1)} = T^{m+1}(\Psi^{(t)} - \tilde{\Phi}^{(0)}),$$

amiből a konvergencia levezethető kihasználva, hogy $\|T\| < 1$ (ugyanis T alterekre megszorított vetítések szorzata, és az egyes tényezők spektrálnormája a megszorítás miatt kisebb, mint 1, hisz a teljes vetítések spektrálnormája lenne 1).

3.3. ACE-algoritmus adatmátrixra simításokkal

Ha az együttes eloszlást nem ismerjük, az n darab $(p+1)$ -dimenziós mintaelemet tartalmazó adatrendszer alapján minimalizálandó célfüggvényt akkor is felírhatjuk

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \left[\Psi(y_k) - \sum_{j=1}^p \Phi_j(x_{kj}) \right]^2$$

alakban, amit amellet a kényszerfeltétel mellett oldunk meg, hogy $\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \Psi^2(y_k) = 1$. Itt a Ψ és Φ_j n értéket felvevő diszkrét függvények, maguk az értékek határozzák meg őket. Lineáris transzformációkkal elérhető, hogy a mintaátlagok nullák.

Az iterációs épések a fentiek azzal a különbséggel, hogy a feltételes várható értéket is a minta alapján képezzük.

Amennyiben változóink diszkrétnek kevés felvehető értékkel, a feltételes várható érték vevés egyszerű átlagolás a feltételben álló változó értékei szerint. Pl. ha egy évfolyam matematika és fizika osztályzatai jelentik a mintát, akkor egy hallgató matematika osztályzatát a következőképpen közelítjük a fizika osztályzata alapján: vesszük azon hallgatók matematika osztályzatának az átlagát, akiknek fizika osztályzata azonos volt a szóban forgó személyével (így nem feltétlenül egész értéket kapunk közelítésként). Amennyiben a vizsgált diszkrét változók sok különböző értéket felvehetnek (pl. életkorok, IQ) vagy méréseink folytonos változókra vonatkoznak (pl. testmagasság, testsúly), ez a módszer nem jár eredménnyel, hanem a következő ún. simító algoritmust alkalmazzuk. Látni fogjuk, hogy a simítások a feltételes várható érték vevés operációjának felelnek meg a folytonos esetben.

Adatrendszerünk az $n \times (p+1)$ -es \mathbf{X} mátrixban foglalható össze, melynek 0. oszlopa a függő, j . oszlopa pedig a j . független változóra vonatkozó n db. mérést tartalmazza. Az i . sorban tehát az i . objektum – általában összefüggő – adatai találhatók (\mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, n$). Ezekhez az algoritmus során további valós értékeket rendelünk, nyilván mindegyik objektumhoz ugyanolyan módon. Jelölje $\Psi, \Phi_1, \dots, \Phi_p$ az oszloponkénti hozzárendelést, ahol az egyes változók minden objektumon kiértékelendők, azaz n -dimenziós oszlopvektort alkotnak.

Egy S -el jelölt simítás az adatmátrix egy n -dimenziós oszlopvektorán működik, de az egyes koordináták adjusztálásakor nemcsak az illető és szomszédos koordinátákat veszi figyelembe, hanem kitekint az x_i koordinátát tartalmazó egész \mathbf{x}_i sorvektorra, mintegy \mathbf{x}_i koordinátáinak algoritmus során adódó lineáris kombinációjára alkalmazva az amúgy n -értékű függvények teréből n -értékű függvények terébe ható simítást. Miután mind a kitekintés (vagyis a többi változó figyelembe vétele), mind a simítás lineáris függvény, az egész operáció mátrixokkal írható le.

Nézzünk először néhány konkrét simítást, ahol $S(\Phi|x_k)$ jelöli a k -adik koordináta simított értékét, $\Phi(\mathbf{x}_m)$ pedig az m -edik koordináta eredeti értékét, ami tehát függ az aktuális adatmátrix egész m -edik sorától.

- a. *Hisztogram.* Az x_k értékek értékkészletét az I_l diszjunkt intervallumokra osztjuk és jelölje az l -edik intervallumba eső értékek számát n_l . Akkor, ha $x_k \in I_l$, akkor

$$S(\Phi|x_k) := \frac{1}{n_l} \sum_{x_m \in I_l} \Phi(\mathbf{x}_m).$$

Itt x_m a kiszemelt oszlop m -edik koordinátája, \mathbf{x}_m pedig az azt tartalmazó sora az adatmátrixnak.

- b. *Legközelebbi szomszéd.* Legyen $l < n$ és $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ (tegyük fel, hogy nincsenek egyenlő értékek).

$$S(\Phi|x_k) := \frac{1}{2l} \left(\sum_{m=-l}^{-1} \Phi(\mathbf{x}_{k+m}) + \sum_{m=1}^l \Phi(\mathbf{x}_{k+m}) \right).$$

- c. *Magfüggvény.* Legyen K valós magfüggvény, maximuma 0-ban van.

$$S(\Phi|x_k) := \sum_m K(x_m - x_k) \cdot \Phi(\mathbf{x}_m) / \sum_i K(x_i - x_k).$$

- d. *Regresszió.* Legyen $l < n$ és $x_1 < x_2 < \dots < x_n$. Lineáris regressziót hajtunk végre az $x_m, \Phi(\mathbf{x}_m)$ értékpárookra, $m = k-l, \dots, k-1, k+1, \dots, k+l$. Jelölje L a regressziós függvényt.

$$S(\Phi|x_k) := L(x_k).$$

A fenti simítások lineárisak és konstans-tartók. A konstanszt a simított értékek átlagának levonásával zéróba tolhatjuk el. Jelölje S_0, S_1, \dots, S_p az adatmátrix egyes oszlopain végrehajtott simításokat, melyekből oszloponként levonjuk az átlagot. Ezekkel az ACE algoritmus iterációja a következő:

1. *Külső ciklus* kezdőértéke: $\Psi^{(0)}(y_k) = y_k - \bar{y}/\|y\|$, ahol $\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i/n$, $\|y\| = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2/n$. $t := 0$.
2. *Belső ciklus.* Az oszlopokból is levonjuk az átlagot, azaz x_{kj} helyébe az $x_{kj} - \bar{x}_j$ értéket írjuk, ahol $\bar{x}_j = \sum_{i=1}^n x_{ij}/n$, $j = 1, \dots, p$. A külső ciklus t -edik lépésében legyen

$$\Phi_j^{(m+1)} := S_j \left(\Psi^{(t)} - \sum_{i < j} \Phi_i^{(m+1)} - \sum_{i > j} \Phi_i^{(m)} \right), \quad j = 1, \dots, p; \quad m = 0, \dots$$

ahol $j = 1, \dots, p$ esetén először az összes Φ_j -t lenullázzuk: $\Phi_j^{(0)}(x_{kj}) := 0$, majd az oszlopokat felülírjuk a simítástól függő, általában szomszédos \mathbf{x}_k vektorok koordinátáinak lineáris kombinációjából számolt értékek simítottjával (a simítást az

oszlop aktuális – még felülrátlan – értékei diktálják). A Φ_j értékeket tartalmazó oszlopvektorok koordinátáiból minden lépésben levonjuk az átlagukat. A belső ciklus addig tart, amíg csak a $\Phi_j^{(m)}$ sorozatok nem konvergálnak; a határértéket jelölje Φ_j ($j = 1, \dots, p$). A konvergencia elég tág feltételek mellett teljesül, l. később.

Ezután visszatérünk a külső ciklusba:

$$\Psi^{(t+1)} := S_0\left(\sum_{j=1}^p \Phi_j\right) / \|S_0\left(\sum_{j=1}^p \Phi_j\right)\|$$

(a koordináták átlaga automatikusan 0), majd $t := t + 1$ -el belépünk a 2. pontbeli belső ciklusba. Itt általában $\Phi_j^{(0)} := \Phi_j$, azaz a konvergencia határértékével kezdünk újra, de akár az eredeti adatokkal is kezdhethetnénk (friss újakezdés). A külső ciklus addig folyik, amíg a $\Psi^{(t)}$ sorozat nem konvergál.

Bevezetve az S_j transzformációknak megfelelő $n \times n$ -es S_j mátrixokat és a $\underline{\Psi} := (\Psi, 0, \dots, 0)$, $\underline{\Phi} := (0, \Phi_1, \dots, \Phi_p)$ ill. $f = (f_0, f_1, \dots, f_n)$ $n \times (p+1)$ -es mátrixokat, az S_j transzformáció hatása egy tetszőleges f -re olyan, hogy az $S_j f$ mátrix i -edik oszlopa 0, ha $j \neq i$, különben pedig

$$(S_j f)_j = f_j + S_j\left(\sum_{i \neq j} f_i\right).$$

Ezért a $\underline{\Psi}$, $\underline{\Phi}^{(m)}$ mátrixokkal kezdve egy teljes belső ciklus

$$\underline{\Psi} - \underline{\Phi}^{(m+1)} = (I - S_p)(I - S_{p-1}) \dots (I - S_1)(\underline{\Psi} - \underline{\Phi}^{(m)}) = T(\underline{\Psi} - \underline{\Phi}^{(m)}) \quad (3.8)$$

alakba írható, ahonnan

$$\underline{\Phi}^{(m)} = \underline{\Psi} - T^m(\underline{\Psi} - \underline{\Phi}^{(0)}). \quad (3.9)$$

A belső ciklus konvergenciája akkor áll be, mikor egy további lépésben már nincs változás, azaz a határértékre

$$(I - S_i)(\underline{\Psi} - \underline{\Phi}) = \underline{\Psi} - \underline{\Phi},$$

vagy ami ezzel ekvivalens,

$$S_i(\underline{\Psi} - \underline{\Phi}) = \mathbf{0}, \quad i = 1, \dots, p \quad (3.10)$$

teljesül, ahol $\mathbf{0}$ az $n \times (p+1)$ -es 0-mátrix. A külső ciklus

$$\underline{\Psi} = S_0 \underline{\Phi} / \|S_0 \underline{\Phi}\|$$

egyenletét is figyelembe véve a (3.10) egyenletrendszer a

$$-\Phi_i + S_i(\Psi - \sum_{j \neq i} \Phi_j) = 0, \quad i = 1, \dots, p$$

alakba írható (jobb oldalon az n -dimenziós 0-vektorral), melynek megoldása:

$$(I - S_i)\Phi_i = S_i\Psi - S_i \sum_{j=1}^p \Phi_j,$$

azaz

$$\Phi_i = (I - S_i)^{-1}S_i\Psi - (I - S_i)^{-1}S_i \sum_{j=1}^p \Phi_j. \quad (3.11)$$

Innen az $A_j := (I - S_j)^{-1}S_j$ ill. $A := \sum_{j=1}^p A_j$ jelöléseket bevezetve, a (3.11) egyenleteket az $i = 1, \dots, p$ indexekre összegezve:

$$\sum_{i=1}^p \Phi_i = A\Psi - A \sum_{j=1}^p \Phi_j,$$

ahonnan

$$\sum_{i=1}^p \Phi_i = (I + A)^{-1}A\Psi.$$

Visszatérve (3.11)-hez,

$$\Phi_i = A_i\Psi - A_i(I + A)^{-1}A\Psi = A_i(I + A)^{-1}\Psi, \quad i = 1, \dots, p \quad (3.12)$$

a megoldás. Tömören: $\underline{\Phi} = P\underline{\Psi}$ megfelelő P lineáris transzformációval (vetítéssel). Azaz az iteráció végén lineáris kapcsolat alakul ki a függő és független változók rendszere közt. Ekkor (3.8) miatt, amennyiben a $\underline{\Phi}^{(m)}$ sorozat $\underline{\Phi}$ -hez konvergál,

$$(I - T)(\underline{\Psi} - P\underline{\Psi}) = \mathbf{0}.$$

Ezzel (3.9)

$$\underline{\Phi}^{(m)} = P\underline{\Psi} - T^m(P\underline{\Psi} - \underline{\Phi}^{(0)})$$

alakba írható. Így a belső ciklus pontosan akkor konvergál, ha $T^m f \rightarrow \mathbf{0}$ ($m \rightarrow \infty$) tetszőleges f esetén. De $\|T\| < 1$ miatt ez teljesül. Figyeljük meg, hogy S_i a (3.7)-beli P_i -nek felel meg ($i = 1, \dots, p$).

Ha feltesszük, hogy a fellépő mátrixok invertálhatók, akkor még bizonyos, a sajátértékekre tett plusz feltételek mellett belátható, hogy a mátrix formában felírt iteráció konvergens. A feltételek a (b) simítások esetén teljesülnek, néha a többiek mellett is beáll a konvergencia. Az is belátható, hogy a kapott határértékek konzisztens becslést szolgáltatnak a Ψ , Φ függvényekre.

3.4. Az ACE-algoritmus outputja

Az algoritmus célja, hogy lineáris kapcsolatot keressen a változók megfelelő függvényei között. Az algoritmus outputjai a következő pontok 2-dimenziós plotjai:

- $(y_k, \Psi^*(y_k)), \quad k = 1, \dots, n$
- $(x_{kj}, \Phi_j^*(x_{kj})), \quad k = 1, \dots, n; \quad j = 1, \dots, p$
- $(\Psi^*(y_k), \sum_{j=1}^p \Phi_j^*(x_{kj})), \quad k = 1, \dots, n$

Várható, hogy az első két esetben megkapjuk a változók optimális transzformációit, míg az utolsó esetben lineáris összefüggés alakul ki, amennyiben a célfüggvény végső értéke „kicsi”.

Pl. $p = 1$ esetben az $Y \sim a^X$ modellben $\Psi(Y) = \ln Y$ és $\Phi(X) = (\ln a)X$ jelenti a linearizáló transzformációt, míg tetszőleges p -re az $Y \sim X_1^{a_1} \dots X_p^{a_p}$ ún. multiplikatív modellben a $\Psi(Y) = \ln Y$ ill. $\Phi_1(X_1) = a_1 \ln X_1, \dots, \Phi_p(X_p) = a_p \ln X_p$ transzformációk fognak linearizálni.

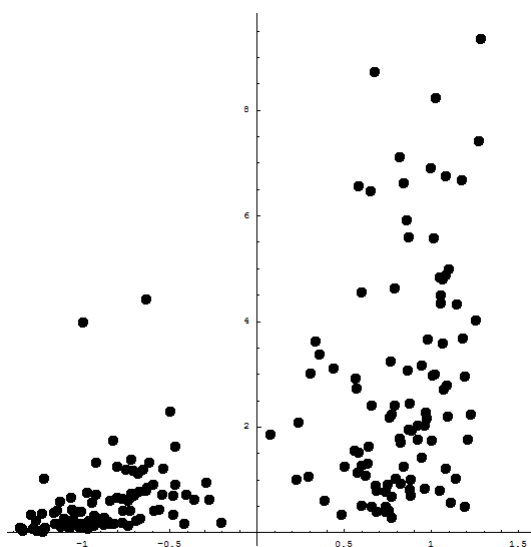
3.5. Alkalmazások

- Egy 200 elemű mintát generálunk. A független, azonos eloszlású (x_k, y_k) mintaelemek a következők:

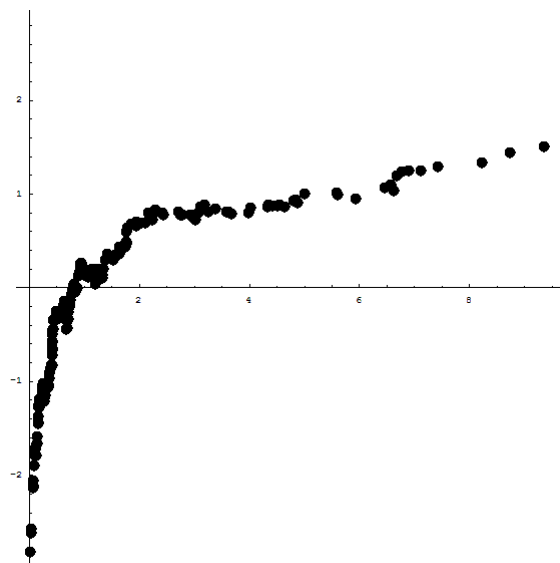
$$y_k = e^{x_k^3 + \varepsilon_k}, \quad k = 1, \dots, 200,$$

ahol x_k^3 és ε_k független, standard normális eloszlásúak.

Az 1. ábra mutatja a generált (x_k, y_k) koordinátájú pontokat ($k = 1, \dots, 200$).

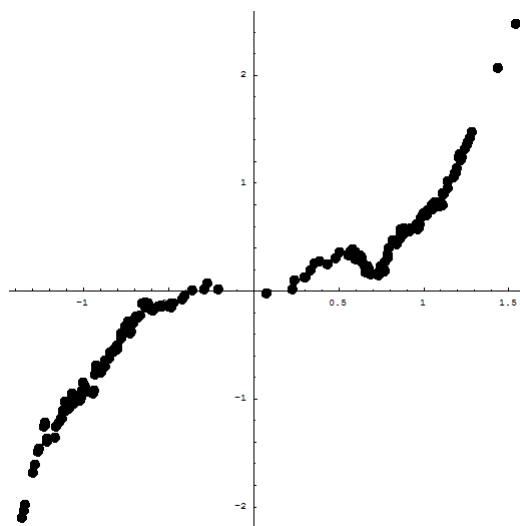


1. ábra



2. ábra

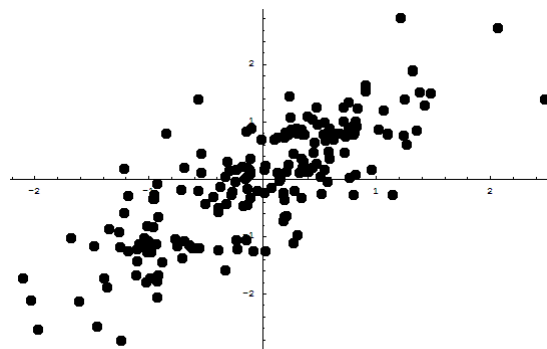
A 2. ábra a függő változó optimális $(y_k, \Psi^*(y_k))$ transzformációját mutatja, ami szemmel láthatóan logaritmikus.



3. ábra

A 3. ábra a független változó optimális $(x_k, \Phi_j^*(x_k))$ transzformációját ábrázolja, ami harmadfokú polinom.

Végül a 4. ábra a $(\Psi^*(y_k), \Phi_j^*(x_k))$ pontok plotja, amely közelebb áll a lineárishoz, mint az eredeti (x_k, y_k) pontok plotja ($k = 1, \dots, 200$).



4. ábra

Az ACE-algoritmusban a simításhoz a legközelebbi szomszéd módszert használtuk.

A példa, webes felületen is megtekinthető.

<http://calculus.hu/autograph/ace.html>

Irodalomjegyzék

- [1] Bolla, M., Hilbert-terek lineáris operátorainak szinguláris felbontása (optimumtulajdonságok statisztikai alkalmazásai és numerikus módszerek), *Alk. Mat. Lapok* **87-88**/3-4 (1987-88), 189–206.
- [2] Bolla, M., Krámli, A., Statisztikai következtetések elmélete. Typotex, Budapest (2005).
- [3] Breiman, L., Friedman, J., Estimating Optimal Transformations for Multiple Regression and Correlation, *J. Amer. Statist. Assoc.* **80** (1985), 580–619.
- [4] Rényi, A., On Measures of Dependence, *Acta Math. Acad. Sci. Hung.* **10** (1959), 441–451.
- [5] Riesz, F., Szőkefalvi-Nagy, B., Funkcionálanalízis. Tankönyvkiadó, Budapest (1988).

4. fejezet

Reprodukáló magú Hilbert-terek

„az Ős vagyok, mely sokasodni foszlik:
apám- s anyámmá válok boldogon,
s apám, anyám maga is ketté oszlik
s én lelkes Eggyé így szaporodom!”
(József Attila: A Dunánál)

A Reprodukáló magú Hilbert-tereket a XX. sz. közepén fedezték fel ([1, 2, 6]), és az utóbbi évtizedekben terjedtek el széles körben a többváltozós statisztikában, nem-linearitások kezelésére. Lényegük, hogy adatainkat egy ún. reprodukáló magú Hilbert-térbe (RMHT) leképezve a szokásos lineáris faktor- és klaszteranalízis eljárások alkalmazhatók ahelyett, hogy az eredeti térben nemlineáris módszereket hajtottunk volna végre. Magukat az adatokat nem is szükséges leképezni, ehelyett egy ún. magfüggvénnyel operálunk.

Maga az elmélet a Riesz–Fréchet Reprézenciós Tétel ([5, 7, 8, 9]) alkalmazása.

4.1. Elméleti háttér

4.1. Definíció Legyen \mathcal{H} Hilbert-tér, mely $\mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ függvényekből áll. \mathcal{H} RMHT, ha az $L_x : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$ ún. kiértékelő leképezés létezik és folytonos $\forall x \in \mathcal{X}$. Az L_x leképezés egy $f \in \mathcal{H}$ függvényhez az

$$L_x(f) = f(x) \quad (4.1)$$

számot rendeli.

A Riesz–Fréchet Reprézenciós Tétel értelmében a \mathcal{H} Hilbert-tér és duálisa (a $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$ folytonos, lineáris funkcionálok, pl. L_x) izometrikusan izomorfak. Ezért bármely L_x -hez egyértelműen tartozik $K_x \in \mathcal{H}$ úgy, hogy

$$L_x(f) = \langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}}, \quad \forall f \in \mathcal{H}. \quad (4.2)$$

Mivel K_x maga $\mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ fv, kiértékelhető bármely $y \in \mathcal{X}$ esetén. Definiáljuk a kétváltozós $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ függvényt a következőképpen:

$$K(x, y) := K_x(y). \quad (4.3)$$

Ezt nevezzük \mathcal{H} reprodukáló magjának. Ekkor (4.1), (4.2) és (4.3) alapján egyrészt

$$K(x, y) = K_x(y) = L_y(K_x) = \langle K_x, K_y \rangle_{\mathcal{H}},$$

másrészt

$$K(y, x) = K_y(x) = L_x(K_y) = \langle K_y, K_x \rangle_{\mathcal{H}}.$$

A (valós) skaláris szorzat szimmetriája miatt K szimmetrikus és

$$K(x, y) = \langle K_x, K_y \rangle_{\mathcal{H}} = \langle K(x, \cdot), K(\cdot, y) \rangle_{\mathcal{H}}, \quad (4.4)$$

és K pozitív definit is (l. Def 4.2.). Ezt nevezik kernel trükknek, mellyel a \mathcal{X} -beli pontok a többi ponthoz való hasonlóságuk alapján reprezentálódnak.

4.2. Definíció Egy szimmetrikus kétváltozós $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ fv-t pozitív definit magnak nevezünk, ha minden $n \in \mathbb{N}$ és $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$ esetén a $K(x_i, x_j) = K(x_j, x_i)$ ($i, j = 1, \dots, n$) elemekből álló szimmetrikus mátrix pozitív szemidefinit.

Legegyszerűbb a lineáris mag:

$$K_{\text{lin}}(x, y) = \langle x, y \rangle_{\mathcal{X}},$$

ha \mathcal{X} részhalmaza egy Euklideszi-térnek.

A következő transzformációk pozitív definit magot eredményeznek:

1. Ha K_1 és $K_2 : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ pozitív definit magok, akkor a $K(x, y) = K_1(x, y) + K_2(x, y)$ mag szintén pozitív definit.
2. Ha $K_1, K_2 : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ pozitív definit magok, akkor a $K(x, y) = K_1(x, y)K_2(x, y)$ mag szintén pozitív definit. Speciálisan, ha K pozitív definit, akkor cK is az $\forall c > 0$.

Következésképpen, ha h egy pozitív együtthatós polinom és $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ pozitív definit mag, akkor $K_h : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ is az, ahol

$$K_h(x, y) = h(K(x, y)). \quad (4.5)$$

Mivel az exponenciális függvény pozitív együtthatós polinomokkal közelíthető, a fenti igaz a $h(x) = e^x$ függvénnyel vagy megfelelő transzformáltjaival is.

Használva az

$$\|x - y\|^2 = \langle x, x \rangle + \langle y, y \rangle - 2\langle x, y \rangle \quad (4.6)$$

összefüggést, a *Gauss mag* is pozitív definit:

$$K_{\text{Gauss}}(x, y) = e^{-\frac{\|x-y\|^2}{2\sigma^2}}, \quad (4.7)$$

ahol $\sigma > 0$ paraméter. Valóban, (4.6) miatt a Gauss mag kétpozitív definit mag szorzataként írható:

$$K_{\text{Gauss}}(x, y) = K_1(x, y)K_2(x, y),$$

ahol

$$K_1(x, y) = e^{-\frac{\langle x, x \rangle + \langle y, y \rangle}{2\sigma^2}},$$

és

$$K_2(x, y) = e^{\frac{\langle x, y \rangle}{\sigma^2}}.$$

Itt K_2 pozitív definit, mivel a $\frac{1}{\sigma^2}K_{\text{lin}}$ egy pozitív definit mag exponenciális függvénye, K_1 pedig a definíció miatt pozitív definit, ui. megmutatjuk, hogy minden $n \in \mathbb{N}$ és $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$ esetén az a mátrix, melynek i, j eleme

$$K_1(x_i, x_j) = e^{-\frac{\langle x_i, x_i \rangle}{2\sigma^2}} \cdot e^{-\frac{\langle x_j, x_j \rangle}{2\sigma^2}}, \quad i, j = 1, \dots, n$$

pozitív szemidefinit. De ez egy 1 rangú mátrix, melynek egyetlen nem-nulla sajátértéke a nyoma (tr), ami pozitív.

Ha $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_n\}$ és \mathbf{S} egy $n \times n$ -es szimmetrikus hasonlósági mátrix, mely az n pont közti páronkénti hasonlóságokból áll, akkor az $e^{\lambda \mathbf{S}}$ mátrix egy *diffúziós magot* definiál, ahol $0 < \lambda < 1$ paraméter. A diffúziós mag mindig pozitív definit, még akkor is, ha \mathbf{S} nem az.

Láttuk, hogy egy RMHT egy pozitív definit magot definiál. A következő tétel (Aronszajn, Moore) azt mutatja, hogy ez megfordítva is igaz.

4.3. Tétel Minden $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ pozitív definit maghoz egyértelműen létezik egy (esetleg végtelen dimenziós) Hilbert-tér, mely $\mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ függvényekből áll, és melynek K reprodukáló magja.

Azaz \mathcal{H} RMHT a K maggal: \mathcal{H}_K . A tétel bizonyítása azon alapul, hogy $\text{Span}\{K_x = K(x, \cdot) \mid x \in \mathcal{X}\}$ egyértelműen meghatároz egy Euklideszi-teret, mely lezárható Hilbert-térre. Ez lesz \mathcal{H}_K .

Néha a \mathcal{H}_K RMHT elemeit egy kézenfekvőbb \mathcal{F} Hilbert-térben szeretnénk megjeleníteni (képzetes tér, feature space). Tegyük fel, hogy létezik egy (általában nem-lineáris) leképezés $\phi : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{F}$ úgy, hogy amennyiben $x \in \mathcal{X}$ képe $\phi(x) \in \mathcal{F}$, akkor

$$K(x, y) = \langle \phi(x), \phi(y) \rangle_{\mathcal{F}}$$

a pozitív definit mag. Ugyanakkor, (4.4) miatt

$$K(x, y) = \langle K_x, K_y \rangle_{\mathcal{H}_K},$$

ahol $K_x = K(x, \cdot)$ egy $\mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ függvény, így nem azonos $\phi(x)$ -el, de összekapcsolhatók a következő transzformáció által. Legyen a T lineáris operátor, mely \mathcal{F} -ről az $\mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ függvények terébe képez, a következőképpen definiálva:

$$(Tf)(y) = \langle f, \phi(y) \rangle_{\mathcal{F}}, \quad y \in \mathcal{X}, f \in \mathcal{F}.$$

Akkor

$$(T\phi(x))(y) = \langle \phi(x), \phi(y) \rangle_{\mathcal{F}} = K(x, y) = K_x(y),$$

ezért

$$T\phi(x) = K_x, \quad \forall x \in \mathcal{X}, \quad (4.8)$$

és \mathcal{H}_K lesz T képtere. Ez csak egy vázlatos bizonyítás volt.

4.2. Példák

Most két példán illusztráljuk \mathcal{H}_K és \mathcal{F} mibenlétét, K_x és $\phi(x)$ -ekkel együtt.

- (a) Legyen K folytonos magja egy pozitív definit Hilbert–Schmidt operátornak, mely integráloperátor az $L_2(\mathcal{X})$ téren, ahol \mathcal{X} kompakt halmaz (pl. \mathbb{R} -ben). Azaz

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} K(x, y) f(x) f(y) dx dy \geq 0, \quad \forall f \in L_2(\mathcal{X}),$$

és $K \in L_2(\mathcal{X} \times \mathcal{X})$:

$$\int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} K^2(x, y) dx dy < \infty.$$

A fenti Hilbert–Schmidt operátor kompakt (teljesen folytonos), így diszkrét spektruma van, melynek 0 az egyetlen lehetséges torlódási pontja. Mivel K szimmetrikus, és pozitív definit, a Hilbert–Schmidt Tétel miatt a fenti integráloperátor sajátértéki valósak, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq 0$, ψ_1, ψ_2, \dots sajátfüggvényekkel, továbbá

$$\sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^2 = \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{X}} K^2(x, y) dx dy < \infty.$$

A Mercer Tétel szerint, ha K folytonos magja egy pozitív definit integráloperátornak $L_2(\mathcal{X})$ -en (\mathcal{X} kompakt halmaz), akkor a mag a

$$K(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i(x) \psi_i(y), \quad \forall x, y \in \mathcal{X}$$

egyenletesen konvergens sorba fejthető.

A RMHT legyen:

$$\mathcal{H}_K = \{f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R} \mid f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i(x) \quad \text{hogy} \quad \sum_{i=1}^{\infty} \frac{c_i^2}{\lambda_i} < \infty\}.$$

Ha $g(x) = \sum_{i=1}^{\infty} d_i \psi_i(x)$, ahol $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{d_i^2}{\lambda_i} < \infty$, akkor $f(x) + g(x) \in \mathcal{H}_K$, mivel $(c_i + d_i)^2 \leq 2(c_i^2 + d_i^2)$; $cf(x) \in \mathcal{H}_K$, ezért \mathcal{H}_K $L_2(\mathcal{X})$ altere.

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}_K} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{c_i d_i}{\lambda_i}.$$

Ekkor

$$K_x = K(x, \cdot) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i(x) \psi_i$$

is \mathcal{H}_K -beli, ui.

$$[K_x](z) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i(x) \psi_i(z)$$

és

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{\lambda_i^2 \psi_i^2(x)}{\lambda_i} = K(x, x) < \infty.$$

Ezért

$$\langle K_x, K_y \rangle_{\mathcal{H}_K} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\lambda_i \psi_i(x) \lambda_i \psi_i(y)}{\lambda_i} = K(x, y). \quad (4.9)$$

Itt \mathcal{H}_K -hoz a következő \mathcal{F} tartozik. \mathcal{F} elemei végtelen dimenziós vektorok:

$$\phi(x) = (\sqrt{\lambda_1} \psi_1(x), \sqrt{\lambda_2} \psi_2(x), \dots), \quad x \in \mathcal{X}$$

ahol

$$\langle \phi(x), \phi(y) \rangle_{\mathcal{F}} = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i(x) \psi_i(y),$$

ami egyenlő $\langle K_x, K_y \rangle_{\mathcal{H}_K}$ -el.

Itt a $\sqrt{\lambda_1} \psi_1, \sqrt{\lambda_2} \psi_2, \dots$ függvények alkotnak ortonormált bázist, és egy $f \in L_2(\mathcal{X})$ \mathcal{H}_K -beli, ha $\|f\|_{\mathcal{H}_K}^2 = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{c_i^2}{\lambda_i} < \infty$. Egy $f \in \mathcal{H}_K$ szintén folytonos. Legyen $\{L_x \mid x \in X\}$ folytonos, lineáris funkcionálok kollekciója, melyre

$$\sup_{x \in \mathcal{X}} \|L_x(f)\| = \sup_{x \in \mathcal{X}} |f(x)| < \infty$$

$\forall f \in \mathcal{H}_K$. Ezért a Banach-Steinhaus Tétel értelmében az egyenletes korlátoztság is igaz:

$$\sup_{x \in \mathcal{X}} \|L_x\| < \infty,$$

vagyis van olyan $B > 0$ konstans, hogy

$$\sup_{x \in \mathcal{X}} \sup_{\|f\|_{\mathcal{H}_K}=1} |f(x)| \leq B < \infty.$$

(b) Legyen \mathcal{X} véges-dimenziós Hilbert-tér (pl. \mathbb{R}^p).

Ha K_{lin} -t alkalmazzuk on $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$ -en, akkor $K_{\mathbf{x}} = \langle \mathbf{x}, \cdot \rangle_{\mathcal{X}}$, és $\phi(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ reprodukálja a magot, mert $K_{\text{lin}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{\mathcal{X}} \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}$. Most a RMHT és \mathcal{F} azonosítható $\mathcal{X} = \mathbb{R}^p$ -vel.

Komplikáltabb magokkal \mathcal{H}_K nem-lineáris függvényekből áll, és $\phi(\mathbf{x})$ -ek magasabb dimenziós terekben realizálhatók.

Pl.

$$K_{\text{poly}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{\mathcal{X}} + c)^d, \quad c \geq 0, d \in \mathbb{N}, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p).$$

Legyen $p = 2, d = 2$. $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \mathcal{X} = \mathbb{R}^2$ esetén

$$\phi(\mathbf{x}) := (x_1^2, x_2^2, \sqrt{2}x_1x_2),$$

azaz $\mathcal{F} \subset \mathbb{R}^3$. Ha pl. az eredeti \mathbb{R}^2 -beli \mathbf{x} -ek koncentrikus körökkel választhatók szét, akkor ilyen klasztereket a k -közép módszerrel nem lehet megtalálni. Azonban a 3-dimenziós $\phi(\mathbf{x})$ -ek már lineárisan szeparálhatók.

Itt

$$\langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle_{\mathcal{F}} = x_1^2y_1^2 + x_2^2y_2^2 + 2x_1x_2y_1y_2 = (x_1y_1 + x_2y_2)^2 = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{\mathcal{X}}^2,$$

ezért $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = [k_{\text{lin}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})]^2$ (polinomiális mag, $c = 0, d = 2$).

A \mathcal{H}_K RMHT, ami \mathcal{F} -hez tartozik most $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ homogén másodfokú polinomokból áll, $f_1 : (x_1, x_2) \rightarrow x_1^2, f_2 : (x_1, x_2) \rightarrow x_2^2, f_3 : (x_1, x_2) \rightarrow \sqrt{2}x_1x_2$ ortonormált bázissal: $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^3 f_i(\mathbf{x})f_i(\mathbf{y})$. Ugyanakkor

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = [K_{\text{lin}}(\mathbf{x}, \mathbf{y})]^2, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}.$$

Itt

$$K_{\mathbf{x}} = \sum_{i=1}^3 f_i(\mathbf{x})f_i = x_1^2f_1 + x_2^2f_2 + \sqrt{2}x_1x_2f_3, \quad \mathbf{x} \in \mathcal{X}.$$

Pl. $f_1 = K_{(1,0)}, f_2 = K_{(0,1)}$, és $f_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(K_{(1,1)} - K_{(-1,1)})$.

Ekkor $\mathcal{F} = \{\phi(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2\} \subset \mathbb{R}^3$, és

$$\langle K_{\mathbf{x}}, K_{\mathbf{y}} \rangle_{\mathcal{H}_K} = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle_{\mathcal{F}} = K(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

azaz nem-lineáris $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ függvényeket reprezentátunk. A következő animációban illusztráljuk a tárgyalt leképezéseket.

4.3. Empirikus kernel

Véges $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ alapján egy *empirikus* $\hat{\phi} : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}^n$ leképezésünk lesz:

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}^{-1/2} \phi_n(\mathbf{x}), \quad (4.10)$$

ahol $\phi_n(\mathbf{x}) = (K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1), \dots, K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_n))^T$ megfelel $K(\mathbf{x}, \cdot)$ -nek, és $\mathbf{K} = (K_{ij})$ $n \times n$ -es pozitív definit mátrix $K_{ij} = (K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))$, $i, j = 1, \dots, n$ elemekkel (ha \mathbf{K} pozitív szemidefinit, akkor általánosított inverzét vesszük). Mivel

$$\phi_n(\mathbf{x}_i) = \mathbf{K} \mathbf{e}_i,$$

ahol \mathbf{e}_i az i -edik \mathbb{R}^n -beli egységvektor, (4.10) alapján

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{K}^{-1/2} \phi_n(\mathbf{x}_i) = \mathbf{K}^{1/2} \mathbf{e}_i$$

és

$$\langle \hat{\phi}(\mathbf{x}_i), \hat{\phi}(\mathbf{x}_j) \rangle = (\mathbf{K}^{1/2} \mathbf{e}_i)^T (\mathbf{K}^{1/2} \mathbf{e}_j) = \mathbf{e}_i^T \mathbf{K} \mathbf{e}_j = K_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

Megjegyezzük, hogy az \mathbf{x}_i adatpontokhoz nem szükséges $\hat{\phi}(\mathbf{x}_i)$ -k kiszámolása, spektrális klaszterezéshez elég, ha páronkénti távolságaikat meghatározzuk a mag alapján:

$$\begin{aligned} \|\hat{\phi}(\mathbf{x}_i) - \hat{\phi}(\mathbf{x}_j)\|^2 &= \langle \hat{\phi}(\mathbf{x}_i), \hat{\phi}(\mathbf{x}_j) \rangle + \langle \hat{\phi}(\mathbf{x}_i), \hat{\phi}(\mathbf{x}_i) \rangle - 2 \langle \hat{\phi}(\mathbf{x}_j), \hat{\phi}(\mathbf{x}_j) \rangle \\ &= K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i) + K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_j) - 2K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \end{aligned}$$

($i, j = 1, \dots, n$). Ha pl. $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle^2$, akkor

$$K_{\text{Gauss}}(\hat{\phi}(\mathbf{x}_i), \hat{\phi}(\mathbf{x}_j)) = e^{-\frac{\|\hat{\phi}(\mathbf{x}_i) - \hat{\phi}(\mathbf{x}_j)\|^2}{2\sigma^2}} = e^{-\frac{\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i \rangle^2 + \langle \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_j \rangle^2 - 2\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \rangle^2}{2\sigma^2}}$$

és ezzel végezhetünk spektrális klaszterezést, melyről a következő fejezetben szólnunk részletesen. Így lineáris módszerek alkalmazhatók a képzetes térben. Azonban az fontos kérdés, hogy milyen magot használjunk. Néha több magot kell összeszorozni, pl. képfelismerő eljárásoknál.

A $K : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ mag *eltolás-invariáns*, ha

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = k(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

valamely $k : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ függvénnyel. Pl. a Gauss-mag ilyen. Ekkor \mathcal{F} végtelen dimenziós, és Fourier elméletet használunk. Mivel az \mathbb{R}^p -n négyzetintegrálható függvények Fourier transformáltjai sebesen csökkennek, \mathcal{H}_K síma függvényekből áll. Gauss mag esetén, l. (4.7):

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = k(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = e^{-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2}{2\sigma^2}} \quad (\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^p),$$

és $K_{\mathbf{x}}$ -ek az ún. radial basis függvények, az RMHT elemei pedig $L_2(\mathbb{R}^p)$ -belifüggvények konvolúciói $e^{-\frac{\|\mathbf{x}\|^2}{\sigma^2}}$ fv-ekkel. Az RMTH ritkul $L_2(\mathbb{R}^p)$ -tol \emptyset -ig, amint σ nő 0-tól ∞ -ig. Ezért a Gauss-magok pl. az ACE-beli simításra is használhatók.

Ha \mathcal{X} valószínűségi mező és a szorzattér egy együttes eloszlással van ellátva, akkor kereshetjük az ún. \mathcal{F} -korrelációt, mely a valószínűségi változók ϕ -függvényei közt fellépő maximális korreláció. Leképezve az adatokat, főkomponens vagy kanonikus korreláció analízist hajthatunk végre \mathcal{F} -ben, amik az eredeti térbeli nem-lineáris módszereknek felelnek meg. Ilyen pl. az ICA (Independent Component Analysis = Független Komponens Analízis), mely nem-normális eloszlású változókra alkalmazható. A többváltozós statisztika és alakfelismerés területéről számos példa található az [3, 4, 10, 11, 12] cikkekben.

4.4. Szemléletes példák

<http://autograph-maths.com/activities/jozsefcicsman/rep2D.html>

Irodalomjegyzék

- [1] Ando, T., RKHS and quadratic inequalities. Lecture Notes, Hokkaido University, Sapporo, Japan (1987).
- [2] Aronszajn, N., Theory of Reproducing Kernels, *Transactions of the American Mathematical Society* **68** (1950), 337–404.
- [3] Bach, F. R., Jordan, M. I., Kernel Independent Component Analysis, *Journal of Machine Learning Research* **3** (2002), 1–48.
- [4] Bengio, Y., Delalleau, O., Le Roux, N., Paiement, J-F., Vincent, P., Ouimet, M., Learning eigenfunctions links spectral embedding and kernel PCA, *Neural Computation* **16** (2004), 2197–2219.
- [5] Fréchet, M., Sur les ensembles de fonctions et les opérations linéaires, *C. R. Acad. Sci. Paris* **144** (1907), 1414–1416.
- [6] Parzen, E., Probability density functionals and reproducing kernel Hilbert spaces. In *Proceedings of the Symposium on Time Series Analysis*, M. Rosenblatt ed., Providence, RI, Brown University (1963), pp. 155–169.
- [7] Riesz, F., Sur une espèce de géométrie analytique des systèmes de fonctions sommables, *C. R. Acad. Sci. Paris* **144** (1907), 1409–1411.
- [8] Riesz, F., Sur les opérations fonctionnelles linéaires. *C. R. Acad. Sci. Paris* **149** (1909), 974–977.
- [9] Riesz, F., Sz.-Nagy, B., *Leçons d'analyse fonctionnelle*. Academic Publishing House, Budapest (1952).
- [10] Shawe-Taylor, J., Cristianini, N., Kernel Methods for Pattern Analysis. Cambridge University Press (2004).
- [11] Schölkopf, B., Smola, A. J., Müller, K-R., Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem, *Neural Comput.* **10** (1998), 1299–1319.
- [12] Schölkopf, B., Smola A. J., Learning with Kernels. MIT Press, Cambridge (2002).

5. fejezet

Spektrális klaszterezés

„Vágom a fát hűvös halomba,
fényesül a görcse sikongva...”
(József Attila: Favágó)

Egyszerű és élsúlyozott gráfok, továbbá hipergráfok klaszteresedési tulajdonságait vizsgáljuk lineáris algebrai segédeszközökkel. A csúcsok optimális részhalmazait (klasztereit) különböző kritériumok alapján keressük. Alapesetben az egymással szorosan összefüggő csúcsok (melyek 'sok', 'nagy' súlyú éllel vannak összekötve) tartoznak egy klaszterbe; ez megfelel a fizikusok által definiált ún. 'community structure'-nek és a Newman–Girvan modularitás maximalizálásával vagy minimális többrészes vágások keresésével oldható meg, l. [5, 6, 9, 10, 12, 35, 67, 68, 71]. Ellenkező esetben éppen a laza összeköttetésben vagy összeköttetésben egyáltalán nem levő csúcsok alkotnak klasztereket; ez megfelel a fizikusok által definiált ún. 'anticommunity structure'-nek, és a stratégiai interakciós hálózatok ún. 'strategic substitutes' játékainak optimumát adó megoldásoknak, l. [7, 41], ugyancsak kapcsolódik a max-cut problémához, l. [65]. Általános esetben a klaszterek közti élsűrűséget szeretnénk minél homogénebbé tenni, azaz a klaszterek páronkénti diszkrepanciáját minimalizálni; ez megfelel ún. reguláris klaszterpárok keresésének, melyek létezésére (esetleg óriási) klaszterszámmal elméleti garanciát ad a Szemerédi Regularitási Lemma, l. [47, 76, 79].

Megmutatjuk, hogy ezekért a tulajdonságokért a (néha normált) Laplace ill. modularitás mátrix szélső, ún. strukturális sajátértékei a felelősek, maguk a klaszterek pedig a hozzájuk tartozó sajátvektorok segítségével állapíthatók meg. Általánosítjuk a Laplace mátrix fogalmát hipergráfokra is, ahol a csúcsok átfedő és az élek diszjunkt klasztereit keressük. Az algoritmusok mindig a megfelelő mátrix spektrálfelbontásán alapulnak.

Foglalkozunk továbbá véletlen, illetve zajos gráfokkal, mint például a klasszikus Erdős–Rényi modell általánosításaként kapott véletlen gráfokkal és sztochasztikus blokkmodellekkel, melyekben vizsgáljuk a strukturális sajátértékek és hozzájuk tartozó sajátalterek aszimptotikus viselkedését, amint a csúcsok száma és ezzel együtt a blokkméretek

végtelenbe tartanak.

5.1. Gráfok és hipergráfok reprezentációja

5.1.1. Egyszerű és súlyozott gráfok

Először élsúlyozott gráfokat reprezentálunk. Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ súlyozott gráf a V csúcshalmazzal – $V = \{1, \dots, n\}$ – és az $n \times n$ -es \mathbf{W} súlymátrixszal, amelyről feltesszük, hogy szimmetrikus, elemei nem-negatívak, diagonális elemei pedig nullák. Az általános w_{ij} elemre úgy gondolhatunk, mint az i -edik és j -edik csúcsok hasonlóságára, ahol 0 azt jelenti, hogy nincs kapcsolat – azaz él – a két csúcs között. Egyszerű gráf esetén \mathbf{W} a 0-1 elemeket tartalmazó szomszédsági mátrix. \mathbf{W} szimmetriája miatt gráfunk irányítatlan.

Bevezetünk még néhány gyakran használt jelölést: \mathbf{W} sorösszegei, a

$$d_i = \sum_{j=1}^n w_{ij}, \quad i = 1, \dots, n$$

számok az ún. általánosított fokszámok (egyszerű gráfok esetén maguk a fokszámok). A $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$ mátrixot fokszám-mátrixnak, míg a $\mathbf{d} = (d_1, \dots, d_n)^T$ vektort fokszám-vektornak nevezzük. Megjegyezzük, hogy alaphoz a vektorokat oszlopvektoroknak tekintjük. Néha szükségünk lesz a $(\sqrt{d_1}, \dots, \sqrt{d_n})^T$ vektorra, melyet $\sqrt{\mathbf{d}}$ -vel jelölünk.

Egyelőre adott $1 \leq k \leq n$ egész mellett keressük a csúcsok k -dimenziós $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n \in \mathbb{R}^k$ reprezentánsait, melyek minimalizálják a

$$Q_k = \sum_{i < j} w_{ij} \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^2 \geq 0 \quad (5.1)$$

célfüggvényt a

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i^T = \mathbf{I}_k \quad (5.2)$$

kényszerfeltétel mellett, ahol \mathbf{I}_k jelöli a $k \times k$ -as identitás mátrixot. A minimumot adó reprezentáció a nagy súlyú élekkel összekötött csúcsokat helyezi közel egymáshoz, ezzel mintegy a csúcsok hasonlóságán alapuló gráf-rajzolást megvalósítva, l. [50].

A minimalizáláshoz jelölje \mathbf{X} a reprezentánsokat soronként tartalmazó $n \times k$ -as mátrixot, és $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ annak oszlopvektorait, melyre az $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k)$ jelölést használjuk. A (5.2)-beli kényszerfeltételek miatt \mathbf{X} oszlopai ortonormáltak, azaz \mathbf{X} egy

ún. szubortogonális mátrix: $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}_k$. Ezzel az (5.1)-beli célfüggvény a

$$\begin{aligned} Q_k &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^2 = \sum_{i=1}^n d_i \|\mathbf{r}_i\|^2 - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} \mathbf{r}_i^T \mathbf{r}_j \\ &= \sum_{\ell=1}^k \mathbf{x}_\ell^T (\mathbf{D} - \mathbf{W}) \mathbf{x}_\ell = \text{tr}[\mathbf{X}^T (\mathbf{D} - \mathbf{W}) \mathbf{X}] = \text{tr}[\mathbf{X}^T \mathbf{L} \mathbf{X}] \end{aligned} \quad (5.3)$$

alakban írható fel, ahol a tr kifejezésben fellépő, és így az optimalizálásban kulcsszerepet játszó mátrixot Laplace mátrixnak nevezzük és \mathbf{L} -el jelöljük. Tehát $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$, ami egyszerű gráfokra a Laplace mátrix szokásos definícióját adja. A Laplace mátrix fizikai jelentéséről és a Laplace operátorral való kapcsolatáról sokat olvashatunk a [8, 21, 27, 63] könyvekben és cikkekben. Megjegyezzük, hogy ha gráfunk a síkbeli rács (I. 4.1.5. alfejezet), akkor Laplace mátrixa a parciális differenciálegyenletek elméletéből ismert Laplace operátor diszkrét közelítésének együtthatómátrixa.

A $k = 1$ esetre alkalmazva a (5.3) formulát, $Q_1 \geq 0$ adódik, ami egy kvadratikus alak, és így a Laplace mátrix pozitív szemidefinit. Könnyű látni, hogy 0 mindig sajátértéke \mathbf{L} -nek az azonosan 1 koordinátákat tartalmazó $\mathbf{1}$ vektorral, mint sajátvektorral, hiszen az \mathbf{L} mátrix sorösszegei nullák. Azt is be lehet látni (hivatkozunk a [59] cikkekre), hogy a 0 sajátérték multiplicitása megegyezik a gráf összefüggő komponenseinek számával. Mit értünk összefüggő komponensen élsúlyozott gráf esetén? Olyan feszített részgráfokat, amelyek közt nem fut él (0 súlyú élek futnak), a részgráfok viszont összefüggőek olyan értelemben, hogy bármely csúcsukból bármely másikba eljuthatunk pozitív súlyú éleken. $G = (V, \mathbf{W})$ összefüggő komponenseinek száma valójában a \mathbf{W} mátrix azon diagonális blokkjainak a maximális száma, melyek előállnak a szimmetrikus \mathbf{W} mátrix sorainak és oszlopainak ugyanolyan permutációjával. Miután az egyes tulajdonságok komponensenként vizsgálhatók, a továbbiakban összefüggő gráfokkal foglalkozunk, melyekre a \mathbf{W} mátrix irreducibilis, és az \mathbf{L} mátrix 0 sajátértéke egyszeres az $\mathbf{1}$, vagy az egység-normájú $\mathbf{u}_0 = \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbf{1}$ sajátvektorral.

5.1. Tétel *Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ élsúlyozott gráf az \mathbf{L} Laplace mátrixszal. Legyenek $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1}$ \mathbf{L} sajátértékei a hozzájuk tartozó egységnormájú $\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{n-1}$ sajátvektorokkal. Legyen $k < n$ pozitív egész, melyre $\lambda_{k-1} < \lambda_k$. Akkor a (5.1) célfüggvény minimuma a (5.2) kényszerfeltétel mellett*

$$\sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i = \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i,$$

és a minimum azokkal az $\mathbf{r}_1^, \dots, \mathbf{r}_n^*$ reprezentánsokkal érhető el, melyek az $\mathbf{X}^* = (\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k-1})$ mátrix sorvektorai.*

A bizonyítás megtalálható [10]-ban, és a $\text{tr}[\mathbf{X}^T \mathbf{L} \mathbf{X}]$ minimumára vonatkozó lineáris algebrai állításból adódik az $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}_k$ kényszerfeltétel mellett (l. a [1]-beli Lineáris algebrai emlékeztetőt).

5.2. Definíció A 5.1. tételbeli optimumot adó $\mathbf{r}_1^*, \dots, \mathbf{r}_n^*$ vektorokat a csúcsok optimális k -dimenziós reprezentánsainak nevezzük, az \mathbf{L} mátrix $\mathbf{u}_0, \dots, \mathbf{u}_{k-1}$ sajátvektorait pedig az optimális reprezentációban részt vevő vektorkomponenseknek.

Megjegyezzük a következőket:

- A dimenzió (k) egyelőre nem játszik lényeges szerepet, hiszen a vektorkomponensek egymás után választhatók be olyan k -ig, melyre $\lambda_{k-1} < \lambda_k$.
- A k -nál kisebb indexű, esetleges többszörös sajátértékhez tartozó sajátvektorok egy sajátaltérben belül tetszőlegesen választhatók az ortonormáltsági feltételek mellett. A reprezentánsok ugyancsak elforgathatók \mathbb{R}^k -ban: a célfüggvény és a kényszerfeltételek ui. nem változnak, ha \mathbf{r}_i helyett $\mathbf{R}\mathbf{r}_i$ -t használunk, vagy – ami ezzel ekvivalens – \mathbf{X} helyett $\mathbf{X}\mathbf{R}$ -t, ahol \mathbf{R} tetszőleges $k \times k$ -as ortogonális mátrix.
- Mivel az \mathbf{u}_0 sajátvektor azonos koordinátákat tartalmaz, a reprezentánsok első koordinátái megegyeznek, és így nem informatívak azok elhelyezkedésére nézve. Ezért \mathbf{u}_0 kihagyható, és csak az $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k-1}$ vektorkomponenseket használjuk a reprezentációhoz.
- Feltettük, hogy a \mathbf{W} mátrix diagonális nullá, azaz nincsenek hurokélek. Az \mathbf{L} mátrix definíciója miatt azonban \mathbf{L} -be a \mathbf{W} mátrix diagonális elemei nem számítanak bele, így akár hurokéleket is megengedhetnénk. Ez nem teljesül majd a normált Laplace mátrixra.

5.1.2. Hipergráfok

Legyen $H = (V, E)$ egy hipergráf, ahol $V = \{v_1 \dots v_n\}$ jelöli a csúcsok, $E = \{e_1 \dots e_m\}$ pedig a hiperélek halmazát. H egyértelműen megadható az $n \times m$ -es \mathbf{A} incidenciamátrixszal, melynek általános eleme $a_{ji} = \mathcal{I}(v_j \in e_i)$, ahol a $v \in e$ reláció azt jelöli, hogy a v csúcs benne van az e hiperélben:

$$\mathcal{I}(v \in e) = \begin{cases} 1 & \text{ha } v \in e \\ 0 & \text{ha } v \notin e. \end{cases}$$

Legyen k ($1 < k \leq n$) rögzített egész. Keressük a csúcsok $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ és az élek $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_m$ k -dimenziós reprezentánsait a

$$\sum_{j=1}^n \mathbf{x}_j \mathbf{x}_j^T = \mathbf{I}_k \quad (5.4)$$

kényszerfeltétel mellett úgy, hogy az élek költségösszegét kifejező

$$Q = \sum_{i=1}^m K(e_i) \quad (5.5)$$

célfüggvény minimális legyen, ahol

$$K(e_i) := \sum_{j=1}^n a_{ji} \|\mathbf{x}_j - \mathbf{y}_i\|^2 \quad (5.6)$$

az e_i hiperél reprezentálásának költsége.

A célfüggvény konstrukciója olyan, hogy a hipergráf élei össze szeretnék húzni a csúcsok reprezentánsait, míg a kényszerfeltétel kifeszíti azokat. Az optimális reprezentáció bizonyos kompromisszum: azok a csúcsok kerülnek közel egymáshoz, amelyek sok közös élben vannak benne.

Ezekután a célfüggvényt a következő lépésekben minimalizáljuk. Jelölje $\bar{\mathbf{x}}(e)$ az e hiperélet alkotó csúcsok reprezentánsainak átlagát:

$$\bar{\mathbf{x}}(e) := \frac{1}{|e|} \sum_{j=1}^n \mathcal{I}(v_j \in e) \mathbf{x}_j. \quad (5.7)$$

Jelölje $\mathbf{X} := (\mathbf{x}_1 \cdots \mathbf{x}_n)$ és $\mathbf{Y} := (\mathbf{y}_1 \cdots \mathbf{y}_m)$ a csúcsok és élek reprezentánsaiból, mint oszlopvektorokból álló $k \times n$ -es ill. $k \times m$ -es mátrixokat, továbbá \mathbf{D}_v ill. \mathbf{D}_e a csúcs- ill. él-fokszámokat tartalmazó $n \times n$ -es ill. $m \times m$ -es diagonálmátrixokat (a diagonálisban álló elemek valójában az incidenciamátrix sor- és oszlopösszegei). Feltehető, hogy \mathbf{D}_e nem szinguláris (nincsen üres él).

Ezekkel a jelölésekkel $K(e)$ csökkenthető a Steiner-formula segítségével:

$$K(e) \geq \sum_{j=1}^n \mathcal{I}(v_j \in e) \|\mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}(e)\|^2, \quad e \in E.$$

A jobb oldalt $L(e, \mathbf{X})$ -szel jelölve, egy kis számolással

$$L(e, \mathbf{X}) = \frac{1}{2|e|} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathcal{I}(v_i \in e) \mathcal{I}(v_j \in e) \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2, \quad e \in E \quad (5.8)$$

adódik. Az $L(\mathbf{X}) := \sum_{e \in E} L(e, \mathbf{X})$ jelöléssel a $Q \geq L(\mathbf{X})$ egyenlőtlenség a csúcsok bármely \mathbf{X} reprezentációjára fennáll. $L(\mathbf{X})$ viszont általánosított kvadratikus alakra hozható:

$$L(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left[\frac{1}{2} \sum_{e \in E} \mathcal{I}(v_i \in e) \mathcal{I}(v_j \in e) \frac{1}{|e|} \right] \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_{ij} \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j, \quad (5.9)$$

ahol

$$c_{ij} = \begin{cases} - \sum_{e \in E} \mathcal{I}(v_i \in e) \mathcal{I}(v_j \in e) \frac{1}{|e|}, & \text{ha } i \neq j \\ s_i - \sum_{e \in E} \mathcal{I}(v_i \in e) \frac{1}{|e|} = s'_i - \sum_{|e| > 1} \mathcal{I}(v_i \in e) \frac{1}{|e|}, & \text{ha } i = j, \end{cases} \quad (5.10)$$

ahol $s'_i = \#\{e \in E : v_i \in e, |e| > 1\}$.

5.3. Definíció Az (5.9)-beli kvadratikus alak mátrixát a H hipergráf Laplace mátrixának nevezzük és \mathbf{C} -vel jelöljük.

\mathbf{C} elemei (5.10) alapján számolhatók, mátrix jelöléssel pedig $\mathbf{C} = \mathbf{D}_v - \mathbf{A}\mathbf{D}_e^{-1}\mathbf{A}^T$. Megmutatható, hogy egyszerű gráfra (minden él két csúcsot tartalmaz), $\mathbf{C} = \frac{1}{2}\mathbf{L}$, ahol \mathbf{L} a 5.1.1 paragrafusban definiált Laplace mátrix. Továbbá egy (V, E) hipergráfhoz egyértelműen hozzárendelhető a (V, \mathbf{W}) élsúlyozott gráf úgy, hogy Laplace mátrixaik meg egyezzenek a következőképpen:

$$w_{ij} = \sum_{i,j \in e} \frac{1}{|e|}.$$

Most minimalizáljuk a fenti $L(\mathbf{X})$ -szel jelölt általánosított kvadratikus alakot a (6.1) kényszerfeltétel mellett. Könnyen látható, hogy a minimalizálandó kifejezés nem más, mint $\text{tr}[\mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{X}^T]$, a kényszerfeltétel pedig $\mathbf{X}\mathbf{X}^T = \mathbf{I}_k$. Mivel az $n \times n$ -es \mathbf{C} mátrix szimmetrikus és pozitív szemidefinit, egy – homogén kvadratikus alakok szélsőértékeire vonatkozó – tétel szerint bebizonyítottuk a következő Reprerentációs Tételt hipergráfokra:

5.4. Tétel A (6.2) célfüggvény minimuma a (6.1) kényszerfeltétel mellett

$$\sum_{j=1}^k \lambda_j, \quad (5.11)$$

ahol $0 = \lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1}$ jelöli a \mathbf{C} Laplace mátrix sajátértékeit. A minimum azon az \mathbf{X} k -dimenziós euklideszi reprezentáción éretik el, amely a \mathbf{C} mátrix k legkisebb sajátértékéhez tartozó páronként ortogonális, normált sajátvektorait tartalmazza soraiban, a sajátértékek növekvő sorrendje szerint. Egy ilyen optimális \mathbf{X} -et \mathbf{X}^* -gal jelölve, az élek optimális reprezentációjára $\mathbf{Y}^* = \mathbf{X}^*\mathbf{A}\mathbf{D}_e^{-1}$ adódik.

A reprezentációról hasonlóak mondhatók el, mint az előző paragrafusban. Láttuk, hogy a hiperélek reprerentánsai az abban foglalt csúcsok reprezentánsainak átlagai, ebből adódik az élek optimális reprezentációja.

5.1.3. Normált Laplace mátrix

Most a $G = (V, \mathbf{W})$ súlyozott gráf csúcsait is súlyozzuk az s_1, \dots, s_n pozitív súlyokkal. Jelölje \mathbf{S} az ezeket a súlyokat ilyen sorrendben diagonálisában tartalmazó diagonálmátrixot. Most a (5.3)-beli Q_k célfüggvényt az $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ reprezentánsokra tett $\sum_{j=1}^n s_j \mathbf{r}_j \mathbf{r}_j^T = \mathbf{X}^T \mathbf{S} \mathbf{X} = \mathbf{I}_k$ és $\sum_{j=1}^n s_j \mathbf{r}_j = \mathbf{0}$ kényszerfeltételek mellett minimalizáljuk. Mivel most

$$Q_k = \text{tr} \mathbf{X}^T \mathbf{L} \mathbf{X} = \text{tr}(\mathbf{S}^{1/2} \mathbf{X})^T [\mathbf{S}^{-1/2} \mathbf{L} \mathbf{S}^{-1/2}] (\mathbf{S}^{1/2} \mathbf{X})$$

alakban írható, és az $\mathbf{S}^{1/2} \mathbf{X}$ mátrix szubortogonális, Q_k minimumát a szögletes zárójelben álló, a továbbiakban \mathbf{L}_S -el jelölt súlyozott Laplace mátrix (amely szintén szimmetrikus,

szinguláris, pozitív szemidefinit) $k - 1$ legkisebb pozitív sajátértékének összege adja, az optimális $(k - 1)$ -dimenziós reprezentánsok pedig az $\mathbf{S}^{1/2}\mathbf{X}^*$ mátrix soraiból nyerhetők, mely a megfelelő sajátvektorokat tartalmazza oszlopaiban, és az első oszloptól eltekintünk.

A továbbiakban az $\mathbf{S} = \mathbf{D}$ speciális esettel foglalkozunk csak, amikor is a csúcsok az általánosított fokokkal vannak súlyozva. Ekkor az

$$\mathbf{L}_D = \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1/2} = \mathbf{I}_n - \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{W}\mathbf{D}^{-1/2}$$

mátrixot normált Laplace mátrixnak nevezzük. Ez nem más, mint identitás mínusz az ún. normált élsúly mátrix, $\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{W}\mathbf{D}^{-1/2}$. Utóbbi mátrix egy normált kontingenciatábla speciális (szimmetrikus) esete, melyről tudjuk, hogy sajátértékei korrelációk, így a $[-1, 1]$ intervallumban helyezkednek el. Az is is ismert továbbá, hogy a legnagyobb sajátérték mindig 1, és egyszeres, ha G összefüggő (\mathbf{W} irreducibilis), a hozzá tartozó sajátvektor pedig a $\sqrt{\mathbf{d}}$ vektor. Következésképpen, az összefüggő G mátrix normált Laplace spektruma:

$$0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_{n-1} \leq 2$$

az $\mathbf{u}_0 = \sqrt{\mathbf{d}}, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{n-1}$ ortonormált sajátvektorokkal. Megjegyezzük, hogy egyszerű gráfok esetében 2 pontosan akkor sajátérték, ha G páros gráf. **5.1.5**

A reprezentációs tétel pedig a következőképpen alakul.

5.5. Tétel *Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ élsúlyozott gráf az \mathbf{L}_D normált Laplace mátrixszal. Legyenek $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1}$ \mathbf{L}_D sajátértékei a hozzájuk tartozó egységnormájú $\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{n-1}$ sajátvektorokkal. Legyen $k < n$ pozitív egész, melyre $\lambda_{k-1} < \lambda_k$. Akkor a Q_k célfüggvény minimuma a*

$$\sum_{j=1}^n d_j \mathbf{r}_j \mathbf{r}_j^T = \mathbf{X}^T \mathbf{D} \mathbf{X} = \mathbf{I}_k, \quad \sum_{j=1}^n d_j \mathbf{r}_j = \mathbf{0}$$

kényszerfeltételek mellett

$$\sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i = \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i,$$

és a minimum azokkal az optimális $\mathbf{r}_1^*, \dots, \mathbf{r}_n^*$ reprezentánsokkal érhető el, melyek az $\mathbf{X}^* = \mathbf{D}^{-1/2}(\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k-1})$ mátrix sorvektorai.

Mivel $\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{u}_0 = \mathbf{1}$, az első oszlop ismét kihagyható a reprezentációból.

5.1.4. Modularitás mátrix

Az \mathbf{M} -el jelölt modularitás mátrixot Newman és Girvan vezették be [67, 68]-ben egyszerű gráfokra, és [16]-ben természetes módon kiterjesztettük a fogalmat a $G = (V, \mathbf{W})$ élsúlyozott gráfra:

$$\mathbf{M} = \mathbf{W} - \mathbf{d}\mathbf{d}^T, \quad (5.12)$$

ha $\sum_{i=1}^n d_i = 1$. Könnyen látható, hogy 0 mindig sajátértéke \mathbf{M} -nek az $\mathbf{1}$ vektorral, mint sajátvektorral (hiszen \mathbf{M} sorösszegei nullák). Azonban, míg egy nem összefüggő gráf Laplace spektruma az összefüggő komponensek spektrumainak uniója, ez nem teljesül a modularitás mátrixra. Mivel $\text{tr}\mathbf{M} < 0$, \mathbf{M} -nek mindig van negatív sajátértéke, és általában indefinit. Belátható, hogy egy egyszerű gráf modularitás mátrixa pontosan akkor negatív szemidefinit, ha a gráf teljes vagy teljes k -részes valamely $k < n$ egésszel. Newman és Girvan motivációja a modularitás mátrix bevezetésével olyan csúcsklaszterek (modulok) keresése volt, melyeken belül a csúcsok közti kapcsolatok sűrűbbek, mint azt független kapcsolódás esetén várnánk.

[16]-ben bevezettük a normált modularitás mátrix fogalmát is:

$$\mathbf{M}_D = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{M} \mathbf{D}^{-1/2} = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{W} \mathbf{D}^{-1/2} - \sqrt{\mathbf{d}} \sqrt{\mathbf{d}}^T = \mathbf{I}_n - \mathbf{L}_D - \sqrt{\mathbf{d}} \sqrt{\mathbf{d}}^T.$$

Mivel a normált súlymátrixból levont 1 rangú $\sqrt{\mathbf{d}} \sqrt{\mathbf{d}}^T$ diád egyetlen nem-nulla sajátértéke 1 a $\sqrt{\mathbf{d}}$ sajátvektorral, az \mathbf{M}_D mátrix spektruma csak abban különbözik a $\mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{W} \mathbf{D}^{-1/2}$ mátrixétól, hogy annak 1 sajátértéke az \mathbf{M}_D mátrix 0 sajátértékévé válik a $\sqrt{\mathbf{d}}$ sajátvektorral. Így \mathbf{M}_D spektruma is $[-1, 1]$ -beli és tartalmazza a 0-t, továbbá 1 nem lehet sajátérték, ha a gráf összefüggő; és egyszerű gráfok esetében -1 csak akkor sajátérték, ha a gráf páros.

Ezért a 5.5. Tételben vizsgált minimumfeladat az \mathbf{M}_D mátrix segítségével maximumfeladattá fogalmazható át. A későbbiekben, még általánosabban, az \mathbf{M}_D mátrix nagy abszolút értékű sajátértékeit használjuk ún. kis diszkrepanciájú klaszterpárok keresésére.

5.1.5. Nevezetes gráfok spektruma

Triviális, hogy a szomszédsági, Laplace vagy modularitás mátrixok sajátértékei és sajátvektorai nem függenek a csúcsok számozásától, azaz izomorf gráfokra megegyeznek. Vannak azonban ún. kospektrális gráfok, melyek spektruma megegyezik, de nem izomorfak. Ez nem meglepő, hiszen egy szimmetrikus mátrixot a sajátértékei mellett a sajátvektorai is jellemeznek. Ugyanakkor [46]-ben bevezettek olyan gráfosztályt, melyet jellemez Laplace mátrixának spektruma. Érdekes tény, hogy majdnem az összes fa (adott csúcsszám mellett) kospektrális, l. [66].

Most megadjuk néhány gráf Laplace és normált Laplace mátrixának sajátértékét, esetenként a reprezentációhoz használt sajátvektorokat is.

- A K_n teljes gráf Laplace mátrixának sajátértékei a

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_1 = \dots = \lambda_{n-1} = \frac{n(n-1)}{n-1} = n$$

számok, ahol a 0 sajátértékhez tartozó sajátvektor az $\mathbf{1}$ vektor, a másik, n -el egyenlő sajátértékhez pedig az $\mathbf{1}^\perp$ sajátaltér tartozik. Itt az 1-dimenziós reprezentánsok

ugyanabba a pontba esnek, míg az n -dimenziosak egy szimplex csúcsait alkotják \mathbb{R}^n egy $(n-1)$ -dimenziós hipersíkjában.

Mivel K_n reguláris, normált Laplace mátrixának sajátértékei a $\frac{\lambda_i}{n-1}$ számok ugyanazokkal a sajátvektorokkal.

- Legyen P_n a szalag- vagy út-gráf (n csúccsal). Ha a csúcsok a természetes sorrendjükben vannak számozva, akkor az \mathbf{A} szomszédsági mátrix tridiagonális (az azonosan 0 diagonális feletti és alatti sávban 1-esek állnak). Cvetkovic [27] és Lovász [53] könyveikben bebizonyítják, hogy \mathbf{A} sajátértékei a

$$2 \cos \frac{i\pi}{n+1}, \quad i = 1, \dots, n$$

számok. P_n Laplace spektruma (l. [66]) pedig a következő:

$$\lambda_i = 4 \sin^2 \frac{i\pi}{2n} = 2(1 - \cos \frac{i\pi}{n}), \quad i = 0, 1, \dots, n-1.$$

Így a legkisebb pozitív Laplace sajátérték $\lambda_1 = 2(1 - \cos \frac{\pi}{n})$, mely szerepet játszik majd a következő részben. Páratlan n ($n = 2\ell + 1$) esetén, a λ_1 -hez tartozó sajátvektor koordinátáival reprezentálva, a reprezentánsok:

$$x_j = \sqrt{\frac{2}{n}} \sin j \frac{\pi}{n}, \quad j = -\ell, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell \quad (5.13)$$

melyek tényleg egy utat alkotnak, azonban a pontok közti távolság szinuszosan rövidül a szélektől távolodva.

P_n normált Laplace mátrixának sajátértékei:

$$1 - \cos \frac{i\pi}{n-1}, \quad i = 0, 1, \dots, n-1.$$

A legnagyobb sajátérték 2, hiszen P_n páros gráf (a páratlan és páros sorszámú csúcsok alkotják a független csúcshalmazokat). 'Nagy' n -re P_n majdnem reguláris, ilyenkor a normált Laplace sajátértékek aszimptotikusan $\frac{1}{2}$ -szeresei a Laplace sajátértékeknek.

- Legyen $G_{m,n}$ a 2-dimenziós $m \times n$ -es rács, ami a P_m és P_n gráfok Descartes-szorzata (direkt összege). Az $mn \times mn$ -es \mathbf{A} szomszédsági mátrix a következőképpen áll elő $P_m \mathbf{A}_m$ -el jelölt és $P_n \mathbf{A}_n$ -el jelölt szomszédsági mátrixából:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_m \otimes \mathbf{I}_n + \mathbf{I}_m \otimes \mathbf{A}_n,$$

és ezért sajátértékei a következők (l. [27]):

$$\alpha_{i,j} = 2 \cos \frac{i\pi}{m+1} + 2 \cos \frac{j\pi}{n+1}, \quad i = 1, \dots, m; \quad j = 1, \dots, n.$$

A [32] cikk alapján, egy Descartes-szorzat gráf Laplace mátrixának sajátértékeire is hasonló teljesül: a két tényező sajátértékeiből alkotott összes lehetséges mn pár összegei ezek:

$$\lambda_{i,j} = 4 \sin^2 \frac{i\pi}{2m} + 4 \sin^2 \frac{j\pi}{2n} = 2(1 - \cos \frac{i\pi}{m}) + 2(1 - \cos \frac{j\pi}{n}),$$

$$i = 0, 1, \dots, m-1; \quad j = 0, \dots, n-1.$$

Magasabb dimenzióban tekintsük a $Grid_{d,\ell}$ d -dimenziós kockarácsot $n = (2\ell + 1)^d$ csúccsal. $Grid_{d,\ell}$ d darab $P_{2\ell+1}$ gráf Descartes-szorzata. Ezért $Grid_{d,\ell}$ sajátértékei:

$$2 \sum_{j=1}^d \cos \frac{i_j \pi}{2\ell + 2}, \quad i_1, \dots, i_d = 1, \dots, 2\ell + 1.$$

Hasonló megfontolásokból, $Grid_{d,\ell}$ Laplace mátrixának sajátértékei:

$$\lambda_{i_1, \dots, i_d} = 4 \sum_{j=1}^d \sin^2 \frac{i_j \pi}{2(2\ell + 1)} = 2 \sum_{j=1}^d (1 - \cos \frac{i_j \pi}{2\ell + 1}) \quad (5.14)$$

$$i_1, \dots, i_d = 0, \dots, 2\ell.$$

Ezért a Laplace mátrix legkisebb pozitív sajátértéke

$$4 \sin^2 \frac{\pi}{2(2\ell + 1)} = 2(1 - \cos \frac{\pi}{2\ell + 1})$$

d multiplicitással. A csúcsok d -dimenziós reprezentánsai (a triviális dimenziót le-számítva) \mathbb{R}^n egy d -dimenziós hipersíkjában rácsot alkotnak, ahol a szomszédos csúcsok közti távolságok szintén szinuszosak.

- Legyen K_{n_1, \dots, n_k} a teljes k -részes gráf, ahol $n = \sum_{i=1}^k n_i$ a csúcsok száma, és V_1, \dots, V_k alkotják a csúcsok maximális független részhalmazait, ahol $|V_i| = n_i$ ($i = 1, \dots, k$). Mivel mind a szomszédsági mátrix, mind a Laplace mátrix ún. felfűjt mátrix (l. a 5.18. Definíciót), a Laplace mátrix sajátértékei: 0 egyszeres, $n - n_i$ multiplicitása $n_i - 1$ ($i = 1, \dots, k$), és n multiplicitása $k - 1$. Ha a csúcsokat most a legnagyobb (n -el egyenlő) sajátértékhez tartozó $(k - 1)$ -dimenziós sajátaltérbeli ortonormált sajátvektorok segítségével reprezentáljuk, akkor a $(k - 1)$ -dimenziós reprezentánsok k különböző pontot alkotnak (az azonos független csúcshalmazba eső csúcsok reprezentánsai megegyeznek). Ezzel az általánosabb, struktúra-feltáró reprezentációval a 5.3.2 paragrafusban még foglalkozunk.
- Mint speciális eset megjegyezzük, hogy a K_{n_1, n_2} teljes páros gráf Laplace sajátértékei:

$$\lambda_0 = 0, \lambda_1 = \dots = \lambda_{n_1+n_2-2} = 1, \lambda_{n_1+n_2-1} = 2.$$

Mivel az S_d -vel jelölt csillag-gráf – amely egy központi csúcsból és d végződésből álló $d + 1$ csúcsú gráf – nem más, mint a $K_{1,d}$ gráf, sajátértékei:

$$\lambda_0 = 0, \lambda_1 = \dots, \lambda_{d-1} = 1, \lambda_d = 2.$$

A következő példák néhány nevezetes gráf spektrumát, sajátvektorait és 2-dimenziós reprezentációját szemléltetik.

<http://www.calculus.hu/autograph/a.html>

5.2. Minimális vágások, maximális modularitás

Most a csúcsok partícióin definiálunk minimális vágásokat ill. maximális modularitásokat, melyek optimuma a csúcsok olyan partícióin vétetik fel, ahol az egy klaszterben levő csúcsok közt 'szoros', a különbözőkben levők közt pedig laza az összeköttetés. Ezeket az optimumokat kapcsolatba hozzuk a 5.2. paragrafusbeliekkel, csak itt ún. partícióvektorokon keressük az optimumot, így a Laplace vagy normált Laplace mátrix 'kis' sajátértékeivel alsó korlátot kapunk rájuk. A becslés annál pontosabb, minél közelebb hozhatók a sajátvektorok a partícióvektorokhoz, melyet a k -közép algoritmus célfüggvénye fejez ki, ha k -részes vágásokat keresünk.

5.2.1. Arányos és kiegyensúlyozott vágások

Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ élsúlyozott gráf n csúccsal, \mathbf{W} élsúly mátrixszal és d_1, \dots, d_n általánosított fokokkal. Adott $1 \leq k \leq n$ egész mellett legyen $P_k = (V_1, \dots, V_k)$ a csúcsok k -partíciója, ahol a V_1, \dots, V_k nem-üres, diszjunkt csúcshalmazokat klasztereknek fogjuk nevezni. Az összes k -partíciók száma az $\{n\}_k$ Stirling-féle szám, mely rögzített k esetén n -el exponenciálisan nő (l. [53]). Ezért az összes k -partíción, \mathcal{P}_k -n való minimalizálás nem oldható meg polinom időben, helyette a csúcsok számában köbös idejű ún. spektrális relaxációt alkalmazunk.

Jelölje a V_a, V_b klaszterpár esetén

$$w(V_a, V_b) = \sum_{i \in V_a} \sum_{j \in V_b} w_{ij}$$

a V_a és V_b klaszterek közt átmetsző élek összsúlyát, ha $a \neq b$, egyébként pedig a V_a -n belüli élek összsúlyának kétszeresét.

5.6. Definíció Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ súlyozott gráf és $P_k = (V_1, \dots, V_k)$ a csúcsok k -partíciója. G arányos k -vágása P_k -ban:

$$g(P_k, G) = \sum_{a=1}^{k-1} \sum_{b=a+1}^k \left(\frac{1}{|V_a|} + \frac{1}{|V_b|} \right) w(V_a, V_b) = \sum_{a=1}^k \frac{w(V_a, \bar{V}_a)}{|V_a|},$$

G arányos k -vágása pedig

$$g_k(G) = \min_{P_k \in \mathcal{P}_k} g(P_k, G).$$

Az első alakból látható, hogy az arányos vágás olyan k -partíció lesz minimális, ahol a klaszterek közt kis súlyú élek futnak, a klasztermérete pedig nem különbözik túlságosan. A második alak egyszerű átalakítás következménye.

Amennyiben a klasztermérettel nem súlyoznánk, csak a klaszterek közt átmetsző élek összsúlyát akarnánk minimalizálni, $k = 2$ esetén az ún. min-cut problémát kapnánk. Ennek minimuma a Fiedler-féle élösszefüggőség, ami egyszerű gráfoknál megmutatja, hogy minimum hány él elmozdításával szűnik meg összefüggőségük. A problémát először Hoffman vetette fel (l. [37, 38]), foglalkozott vele Juhász és Mályusz (l. [42]), a [32] cikkben pedig Fiedler alsó és felső becslést ad az élösszefüggőségre a Laplace mátrix legkisebb pozitív sajátértéke segítségével, amit ezért algebrai összefüggőségnek nevez. A becslés az út-gráfra éles (l. az előző paragrafus példája), jöllehet ez bármely él elmozdításával két összefüggő komponensre esik szét, amiken belül nincsen tipikusan erős összefüggés a csúcsok közt. A kiegyensúlyozott vágások ezt próbálják korrigálni.

A 5.1 paragrafus reprezentációs technikájával $g_k(G)$ -re könnyen alsó becslést adhatunk a Laplace mátrix sajátértékei segítségével a következőképpen.

A P_k partícióhoz egyértelműen hozzárendelhetjük a $\mathbf{Z}_k = (\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_k)$ ún. partíció-mátrixot, melynek a -adik oszlopa, $\mathbf{z}_a = (z_{1a}, \dots, z_{na})^T$ szakaszonként konstans:

$$z_{ia} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|V_a|}} & \text{ha } i \in V_a \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (5.15)$$

Normálása miatt a \mathbf{Z}_k mátrix szubortogonális, és az ilyen partíció-mátrixok halmazát \mathcal{Z}_k jelöli. Tekintsük azt a speciális reprezentációt, melyben a csúcsok $\tilde{\mathbf{r}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{r}}_n \in \mathbb{R}^k$ reprezentánsai a Z_k mátrix sorvektorai. Ezzel a 5.6. Definícióbeli kiegyensúlyozott vágás a

$$g(P_k, G) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n w_{ij} \|\tilde{\mathbf{r}}_i - \tilde{\mathbf{r}}_j\|^2 = \sum_{a=1}^k \mathbf{z}_a^T \mathbf{L} \mathbf{z}_a = \text{tr}(\mathbf{Z}_k^T \mathbf{L} \mathbf{Z}_k) \quad (5.16)$$

alakba írható, melyet a $\mathbf{Z}_k \in \mathcal{Z}_k$ mátrixokon minimalizálunk.

5.7. Tétel Jelölje $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1}$ a $G = (V, \mathbf{W})$ összefüggő, súlyozott gráf Laplace mátrixának sajátértékeit. Akkor G arányos k -vágására a

$$g_k(G) \geq \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i$$

alsó becslés teljesül.

Bizonyítás: a fenti diszkrét feladat folytonos relaxációjával történik. A csúcsok $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ k -dimenziós reprezentánsaira a 5.1. Tétel alapján

$$\min_{\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}_k} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n w_{ij} \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^2 = \min_{\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}_k} \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{L} \mathbf{X}) = \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i$$

teljesül, ahol egyenlőség az $\mathbf{X} = (\mathbf{u}_0, \dots, \mathbf{u}_{k-1})$ mátrixszal érhető el.

Mivel egy partíció-mátrix speciális szubortogonális,

$$g_k(G) = \min_{\mathbf{Z}_k \in \mathcal{Z}_k} \text{tr}(\mathbf{Z}_k^T \mathbf{L} \mathbf{Z}_k) \geq \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i, \quad (5.17)$$

ahol egyenlőség csak a $k = 1$ triviális esetben érhető el, különben az \mathbf{u}_i ($i = 1, \dots, k-1$) sajátvektorok nem lehetnek partícióvektorok, mivel koordinátáik összege 0, hiszen ortogonálisak az $\mathbf{u}_0 = \mathbf{1}/\sqrt{n}$ vektorra.

A $k = 2$ esetben $g_2(G)$ -re λ_1 az alsó korlát. A bizonyításból az is látható, hogy a becslés annál élesebb, minél közelebb hozható a k -partíció-vektorok altere a Laplace mátrix k legkisebb sajátértékéhez tartozó sajátvektorai által kifeszített altérhez. Erről és a felső becslésről a [10] cikkben olvashatunk többet. Itt csak annyit jegyzünk meg, hogy ez az altér-eltérés a reprezentánsok

$$S_k^2(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k) = \min_{P_k=(V_1, \dots, V_k)} \sum_{i=1}^k \sum_{j \in V_i} \|\mathbf{r}_j - \mathbf{c}_i\|^2, \quad \mathbf{c}_i = \frac{1}{|V_i|} \sum_{j \in V_i} \mathbf{r}_j$$

k -varianciájával fejezhető ki, melyet a k -közép eljárás minimalizál (erre léteznek polinoidéjú algoritmusok).

Mivel egy hipergráfhoz egyértelműen hozzárendelhető egy élsúlyozott gráf úgy, hogy Laplace mátrixaik csak egy kettes szorzóban különbözzenek, a kiegyensúlyozott vágás fogalma átvihető hipergráfokra is. Azonban ha a vágásbeli nagyméretű hiperéleket is büntetni szeretnénk, akkor cászerűbb a következő mennyiséget tekinteni a $H = (V, E)$ hipergráf minimális k -vágásának:

$$\nu_k(H) := \min_{P_k=(V_1, \dots, V_k)} \sum_{e \in E} \frac{1}{|e|} \sum_{a=1}^{k-1} \sum_{b=a+1}^k |e \cap V_a| \cdot |e \cap V_b|,$$

ahol k a csúcsok számát meg nem haladó pozitív egész, a minimalizálás pedig a csúcsok $P_k = (V_1, \dots, V_k)$ partícióin történik. Itt is be lehet látni, hogy

$$\nu_k(H) \geq \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i,$$

ahol $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1}$ a H hipergráf Laplace mátrixának sajátértékei.

Megjegyezzük, hogy

$$\nu_2(H) \leq \nu_3(H) \leq \dots \leq \nu_n(H).$$

Amennyiben a csúcsok k -dimenziós reprezentánsai jól klaszterednek, $\nu_k(H)$ felülről is becsülhető a k legkisebb Laplace sajátérték összegének konstansszorosával a következőképpen.

5.8. Definíció *A csúcsok $P_k = (V_1, \dots, V_k)$ partíciója jól-szeparált az $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ k -dimenziós reprezentációban, ha a P_k -hoz tartozó c színezéssel megfogalmazva*

$$\frac{\min_{c(v_i) \neq c(v_j)} \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|}{\max_{c(v_i) = c(v_j)} \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|} \geq 1$$

teljesül.

Azaz a különböző klaszterbeli pontok minimális távolsága legalább akkora, mint az azonos klaszterbeliek maximális távolsága.

5.9. Tétel *Tegyük fel, hogy valamely $1 < k \leq n$ egészre a $H = (V, E)$ hipergráf csúcsai optimális k -dimenziós reprezentánsainak létezik jól-szeparált k -partíciója, melyre a klaszterátmérők felső korlátja ε , és $\varepsilon < \frac{1}{2\sqrt{n}}$. Akkor*

$$\nu_k(H) \leq q^2 \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i,$$

ahol $q = 1 + \frac{2\varepsilon}{1-\varepsilon\sqrt{n}}$.

Ebben az esetben a k -közép eljárás iterációja felfedezi a jól-szeparált k -partíciót.

Ezután a $G = (V, \mathbf{W})$ élsúlyozott gráfra a normált vágásokat definiálunk, melyek partíciókon vett minimumát a normált Laplace mátrix sajátértékeivel becsüljük. Itt a kiegyensúlyozás nem a klaszterek mérete, hanem azok térfogata tekintetében történik, ahol az $U \subset V$ csúcshalmaz térfogata a d_1, \dots, d_n általánosított fokokkal a következő:

$$\text{Vol}(U) = \sum_{i \in U} d_i = \sum_{i \in U} \sum_{j=1}^n w_{ij}.$$

5.10. Definíció *Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ súlyozott gráf, melyre $\sum_{i=1}^n d_i = 1$, és $P_k = (V_1, \dots, V_k)$ a csúcsok k -partíciója. G kiegyensúlyozott k -vágása P_k -ban:*

$$\begin{aligned} f(P_k, G) &= \sum_{a=1}^{k-1} \sum_{b=a+1}^k \left(\frac{1}{\text{Vol}(V_a)} + \frac{1}{\text{Vol}(V_b)} \right) w(V_a, V_b) \\ &= \sum_{a=1}^k \frac{w(V_a, \bar{V}_a)}{\text{Vol}(V_a)} = k - \sum_{a=1}^k \frac{w(V_a, V_a)}{\text{Vol}(V_a)}, \end{aligned}$$

G kiegyensúlyozott k -vágása pedig

$$f_k(G) = \min_{P_k \in \mathcal{P}_k} f(P_k, G).$$

Az átalakításnál felhasználtuk, hogy $\sum_{a=1}^k \text{Vol}(V_a) = \sum_{i=1}^n d_i = 1$.

Vegyük észre, hogy $f_k(G)$ azokat a k -partíciókat bünteti, melyekben 'sok', 'nagy' súlyú átmetsző él fut eltérő térfogatú klaszterek közt. $f_2(G)$ -t már a [64] cikkben bevezették egyszerű, a [62] cikkben pedig élsúlyozott gráfokra. Általános k -ra a [6] cikkben lett ilyen néven bevezetve, előtte pedig a [11] cikkben, csak ott k -sűrűségnek neveztük. Utóbbi cikkben, hasonlóan az arányos vágásoknál tárgyalthoz, alsó és felső becslést is adtunk $f_k(G)$ -re a normált Laplace mátrix k legkisebb sajátértéke segítségével. Itt csak az alsó becslést ismertetjük.

5.11. Tétel Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ összefüggő súlyozott gráf, és jelölje $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1} \leq 2$ a gráf normált Laplace mátrixának sajátértékeit. Akkor

$$f_k(G) \geq \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i.$$

Bizonyítás: A bizonyítás hasonlóan megy, mint az arányos vágásoknál, csak itt normált partíciómátrixokat használunk. A P_k partíció szintén egyértelműen meghatározza az $n \times k$ -as $\mathbf{Z}_k = (\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_k)$ ún. normált partíciómátrixot, melynek a -edik oszlopa, a $\mathbf{z}_a = (z_{1a}, \dots, z_{na})^T$ vektor, a következő:

$$z_{ia} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\text{Vol}(V_a)}} & \text{ha } i \in V_a \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases}$$

A $\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{Z}_k$ mátrix triviálisan szubortogonális. Jelölje \mathcal{Z}_k a normált k -partíciómátrixok halmazát!

Ezután a diszkrét feladat folytonos relaxációjával dolgozunk. Az $\tilde{\mathbf{r}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{r}}_n$ k -dimenziós reprezentánsokkal, melyeket az $\tilde{\mathbf{X}}$ mátrix tartalmaz soronként,

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{X}^T \mathbf{D} \mathbf{X} = \mathbf{I}_k} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n w_{ij} \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|^2 \\ &= \min_{\mathbf{X}^T \mathbf{D} \mathbf{X} = \mathbf{I}_k} \text{tr}[(\mathbf{D}^{1/2} \mathbf{X})^T \mathbf{L}_D (\mathbf{D}^{1/2} \mathbf{X})] = \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i = \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i \end{aligned}$$

teljesül, mint azt a 5.5. Tételből (súlyozott gráfokra vonatkozó reprezentációs tétel) tudjuk.

Mivel a \mathbf{Z}_k normált partíciómátrixra $\mathbf{Z}_k^T \mathbf{D} \mathbf{Z}_k = \mathbf{I}_k$, ezért

$$f_k(G) = \min_{\mathbf{Z}_k \in \mathcal{Z}_k^N} \text{tr}(\mathbf{Z}_k^T \mathbf{L} \mathbf{Z}_k) \geq \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i.$$

A felső becslés itt is a reprezentánsok klaszteresedési tulajdonságaitól függ, amit ez esetben az ún. súlyozott k -vágással fejezünk ki. Ezután ezt a mennyiséget a $k = 2$ esetben felülről tudjuk becsülni a normált Laplace mátrix két legkisebb pozitív sajátértékének a hányadosával. Ez a tény azt fejezi ki, hogy a λ_1 és λ_2 közötti rés a spektrumban önmagában is elég f_2 alacsony szintre szorításához. Itt csak a definíciókat és a tételt közöljük, a bizonyítás a [10] cikkben található.

5.12. Definíció Az $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ reprezentánsok súlyozott k -varianciája

$$S_k^2(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k) = \min_{P_k=(V_1, \dots, V_k)} \sum_{i=1}^k \sum_{j \in V_i} d_j \|\mathbf{r}_j - \mathbf{c}_i\|^2, \quad \mathbf{c}_i = \frac{1}{\text{Vol}(V_i)} \sum_{j \in V_i} d_j \mathbf{r}_j,$$

melyet a súlyozott k -közép eljárás minimalizál.

5.13. Tétel Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ összefüggő súlyozott gráf. G normált Laplace mátrixának sajátértékei: $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1}$. Akkor az optimális 2-dimenziós reprezentánsok súlyozott 2-varianciájára

$$S_2^2(\mathbf{r}_1^*, \dots, \mathbf{r}_n^*) \leq \frac{\lambda_1}{\lambda_2}$$

teljesül.

Végezetül szólunk az izoperimetrikus számról, mely a $k = 2$ esetben f_2 nem-szimmetrikus változta és azt fejezi ki, hogy mennyire vágható jól ketté a gráf. Riemann-sokaságokra (l.[19]) vagy még régebben a matematikai fizikában (l. [74]) gyakran használták, és kapcsolatát az ún. expander gráfokkal sokan tárgyalták, l. [1, 28, 40, 58, 63, 64] vagy a [21] összefoglaló monográfia.

5.14. Definíció Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ súlyozott gráf a d_1, \dots, d_n általános fokokkal, melyekről feltesszük, hogy $\sum_{i=1}^n d_i = 1$. G izoperimetrikus száma (más néven Cheeger-konstansa):

$$h(G) = \min_{\substack{U \subset V \\ \text{Vol}(U) \leq \frac{1}{2}}} \frac{w(U, \bar{U})}{\text{Vol}(U)}.$$

Nyilván $0 \leq h(G) \leq 1$, és $h(G) > 0$ pontosan akkor, ha G összefüggő. Az izoperimetrikus szám nagy, ha a csúcsok bármely partíciójára az átmetsző élek összsúlya nagy még a kisebbik rész térfogatához (az onnan kilépő élek összsúlyához) képest is.

A bevezetendő izoperimetrikus egyenlőtlenség azt fejezi ki, hogy amennyiben $h(G)$ élesen elválnak 0-tól, G nem vágható jól két részre, amit az ún. Expander Mixing Lemma is kifejez, l. a 5.20. Tétel és [40]. Az izoperimetrikus szám szorosan összefügg az ún. él-expanzióval és konduktanciával, l. [1, 40, 58].

5.15. Tétel (Cheeger egyenlőtlenség) *Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ összefüggő súlyozott gráf $h(G)$ izoperimetrikus számmal és λ_1 legkisebb pozitív normált Laplace sajátértékkel. Akkor*

$$\frac{\lambda_1}{2} \leq h(G) \leq \min\{1, \sqrt{2\lambda_1}\}$$

és ha $\lambda_1 \leq 1$, akkor

$$h(G) \leq \sqrt{\lambda_1(2 - \lambda_1)}.$$

Megjegyezzük, hogy $\lambda_1 \leq 1$ mindig teljesül, ha a \mathbf{W} mátrix tartalmaz legalább egy nem-0 elemet. Egyszerű gráfoknál láttuk, hogy a teljes gráfra $\lambda_1 = \frac{n}{n-1}$, minden más egyszerű gráfra $\lambda_1 \leq 1$. Az is igaz továbbá, hogy egy egyszerű gráfra $\lambda_1 = 1$ pontosan akkor teljesül, ha az teljes k -részes, valamely $1 \leq k < n$ egésszel.

Megjegyezzük, hogy $\lambda_1 \leq f_2(G) \leq 2h(G)$, így az alsó becslés a normált 2-vágásra bizonyítottból is adódik.

Az izoperimetrikus egyenlőtlenség szintén kapcsolódik az összefüggő gráfon az élek mentén (az élsúlyokkal, mint valószínűséggel) tett véletlen sétákhoz, l. [28, 21, 54, 55, 56, 59, 80]. Maga a séta egy diszkrét idejű $\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_t, \dots$ sztochasztikus folyamattal írható le, melynek állapottere $\{1, \dots, n\}$ és átmenetvalószínűségei:

$$\mathbb{P}(\xi_{t+1} = j \mid \xi_t = i) = \frac{w_{ij}}{d_i}.$$

Az átmenetvalószínűségek nem függenek az időtől. Az átmenetvalószínűség mátrix $\mathbf{D}^{-1}\mathbf{W}$, mely ugyan nem szimmetrikus, de sajátértékei megegyeznek a $\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{W}\mathbf{D}^{-1/2}$ mátrix sajátértékeivel, így valóságok, és nem mások, mint az $1 - \lambda_i$ számok, ahol λ_i -k a normált Laplace mátrix sajátértékei.

A véletlen séta ergodikus pontosan akkor, ha a fenti Markov-lánc irreducibilis ($\lambda_1 > 0$) és aperiodikus ($\lambda_{n-1} < 2$). Ezért egy összefüggő és nem páros gráfon tett sétának egyértelmű stacionárius eloszlás van, ami nem más, mint a $\{d_1, \dots, d_n\}$ fokszámsorozat. A stacionárius eloszláshoz való konvergencia sebessége (keverési idő) annál gyorsabb, minél nagyobb a λ_1 sajátérték. Ezekről és egyéb fizikai paraméterekkel való kapcsolatról bővebben olvashatunk a [54, 77, 80, 81, 82] cikkekben. Bennünket azonban inkább az 'anti-expanderek' érdekelnek, amikor λ_1 a nullához közeleli. A paragrafusbeli eredmények azt sugallják, hogy amennyiben $k - 1$ nullához közeleli sajátérték van a normált Laplace mátrix spektrumában, és a többi ettől élesen elválnak, akkor k lazán összefüggő csúcsklaszterre számíthatunk, és a véletlen séta nagy valószínűséggel a klasztereken belül marad.

A Cheeger-egyenlőtlenség kiterjesztése többszemponútú ($k > 2$) ritka vágásokra megtalálható a [48, 51, 52] cikkekben, melyekben egy, egymással laza összeköttetésben levő V_1, \dots, V_k diszjunkt csúcsalmaz rendszert (nem feltétlenül merítik ki V -t) λ_{k-1} -el hoznak kapcsolatba. Ugyanakkor a normált Laplace mátrix legnagyobb sajátértékére az ún. duális Cheeger-egyenlőtlenség bizonyítható, l. [83]. Ez nagyon felületesen a következőt jelenti: minél közelebb van a gráf egy páros gráfhoz, annál közelebb van λ_{n-1} a 2-höz, azaz a normált Laplace spektrum felső határához, ami szintén egyfajta spektrális rés.

A következő paragrafusban még általánosabban vizsgáljuk a normált Laplace mátrix szélsőséges, vagy ami ezzel ekvivalens, a normált modularitás mátrix nagy abszolút értékű (ún. strukturális) sajátértékeit, és ezek kapcsolatát a klaszteresedéssel.

A klaszterméreteket egyéb célfüggvényekkel figyelembe vevő eljárások is vannak, l. például [29], egyéb szempontokat vet fel [44, 72, 73]. A [67] cikkben bevezetett Newman–Girvan modularitás közvetlenül a belső élek összsúlyának a csúcsok független kapcsolódása esetén várttól való különbségét maximalizálja. Az elnevezés onnan ered, hogy a fizikusok a csúcsklasztereket moduloknak nevezik. A maximalizálásra különböző algoritmusok ismeretesek (l. [30, 67, 68, 69, 24]), ezek nem spektrálisak. Viszont a modularitás mátrix spektrumát használja [70] és [16].

5.16. Definíció Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ súlyozott gráf, ahol \mathbf{W} elemeinek összege 1. A $P_k = (V_1, \dots, V_k)$ partícióhoz tartozó Newman–Girvan modularitás:

$$M(P_k, G) = \sum_{a=1}^k \sum_{i,j \in V_a} (w_{ij} - d_i d_j) = \sum_{a=1}^k [w(V_a, V_a) - \text{Vol}^2(V_a)].$$

Adott $1 \leq k \leq n$ egészre a G gráf k -részes Newman–Girvan modularitása:

$$M_k(G) = \max_{P_k \in \mathcal{P}_k} M(P_k, G).$$

A Newman–Girvan modularitás kapcsolatáról a modularitás mátrix sajátértékeivel és különböző normált változtairól részletesen szólunk a [16] cikkben, melyben azt is megmutatjuk, hogy a normált modularitás maximalizálása ekvivalens a normált k -vágás minimalizálásával ugyanarra a k -ra. A modularitás mátrix előnye, hogy általában indefinit, és a 0 sajátérték egyfajta vízválasztó: a pozitív sajátértékek alapján egymással lazán, a klasztereken belül pedig szorosan összefüggő csúcspartíciót tudunk találni ('community structure'); míg a negatív sajátértékek alapján éppen ellenkezőleg, egymással szorosan, a klasztereken belül pedig lazán összefüggő csúcspartíciót kapunk ('anticommunity structure').

5.3. Általánosított véletlen gráfok

Itt először bevezetünk olyan véletlen gráfokat, melyekre teljesül, hogy akár a szomszédsági, akár a normált modularitás mátrix rendelkezik strukturális sajátértékekkel, melyek

abszolút értéke nagyságrendileg nagyobb a többi sajátértékénél; továbbá a hozzájuk tartozó sajátvektorok segítségével reprezentálva a csúcsokat, a k -közép algoritmus segítségével azokban jól elkülönülő klaszterek fedezhetők fel. Ezután azt vizsgáljuk, hogy egy nagyméretű determinisztikus gráfban hogyan fedezhető fel ilyen ún. reguláris struktúra, amit a klaszterpárok közti diszkrepanciával definiálunk.

5.3.1. Felfújtt zajos mátrixok

Definiálunk egy általános véletlen mátrix fogalmat, mely a Wigner-féle félkörtétel mátrixának általánosítása. Ezt, mint zajt fogjuk hozzáadni speciális determinisztikus blokk-mátrixokhoz.

5.17. Definíció Legyenek w_{ij} -k ($1 \leq i \leq j \leq n$) független, valós értékű valószínűségi változók, melyek ugyanazon a valószínűségi mezőn vannak értelmezve; $w_{ji} = w_{ij}$, $\mathbb{E}(w_{ij}) = 0$ ($\forall i, j$), és w_{ij} -k egyenletesen korlátosak, azaz van olyan $K > 0$ konstans (függetlenül n -től), mellyel $|w_{ij}| \leq K$, $\forall i, j$. A $\mathbf{W}_n = (w_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ szimmetrikus, valós, $n \times n$ -es mátrixot Wigner-zajnak nevezzük.

Megjegyezzük, hogy az egyenletes korlátosság feltétele feloldható, és a következő állítások normális eloszlású mátrixelemek esetén is érvényben maradnak.

A leggyakrabban használt állítás, mely Füredi és Komlós [34] cikkében lett kimondva egy $n \times n$ -es szimmetrikus Wigner-zaj spektrálnormájára, a következő:

$$\|\mathbf{W}_n\| = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i(\mathbf{W}_n)| \leq 2\sigma\sqrt{n} + \mathcal{O}(n^{1/3} \log n) \quad (5.18)$$

1-hez tartó valószínűséggel, ha $n \rightarrow \infty$, ahol σ^2 a w_{ij} elemek varianciájának közös felső korlátja.

5.18. Definíció Legyen $k \leq n$ rögzített pozitív egész. Az $n \times n$ -es szimmetrikus \mathbf{B} mátrixot a $k \times k$ -as szimmetrikus \mathbf{P} mátrix felfújtjának nevezzük ($0 < p_{ij} < 1$), ha vannak olyan n_1, \dots, n_k pozitív egészek ($\sum_{i=1}^k n_i = n$), hogy a \mathbf{B} mátrix sorait és oszlopait ugyanúgy permutálva egy k^2 blokkból álló blokkmátrixot kapunk, ahol az $n_i \times n_j$ -es (i, j) blokk elemei mind p_{ij} -vel egyenlőek ($1 \leq i, j \leq k$).

Most rögzítjük a \mathbf{P} mátrixot és egyre nagyobb $n \times n$ -es \mathbf{B}_n mátrixszá fűjjük fel. Vizsgáljuk az $\mathbf{A}_n = \mathbf{B}_n + \mathbf{W}_n$ véletlen (zajos) mátrixsorozatot, amint $n_1, \dots, n_k \rightarrow \infty$, a következő feltétellel:

$$\frac{n_i}{n} \geq c,$$

ahol $0 < c \leq \frac{1}{k}$ konstans.

Tegyük fel továbbá, hogy \mathbf{W}_n elemeinek egységes K korlátjára

$$K \leq \min\left\{\min_{i,j \in \{1, \dots, k\}} p_{ij}, 1 - \max_{i,j \in \{1, \dots, k\}} p_{ij}\right\} \quad (5.19)$$

teljesül. Így \mathbf{A}_n elemei a $[0, 1]$ intervallumban lesznek, és $G_n = (V, \mathbf{A}_n)$ véletlen élsúlyozott gráfot definiál. A következő speciális Wigner-zajjal el tudjuk érni, hogy G_n egyszerű gráf lesz a véletlen \mathbf{A}_n szomszédsági mátrixszal, melynek elemei az (a, b) blokkban 1-ek p_{ab} és 0-ak $1 - p_{ab}$ valószínűséggel. Ezt a következő \mathbf{W}_n véletlen zajjal tudjuk megoldani: legyen V_1, \dots, V_k a csúcsok felfűzés szerinti k -partíciója, $|V_a| = n_a$ ($a = 1, \dots, k$). Az $1 \leq a < b \leq k$ egészekre és az $i \in V_a, j \in V_b$ indexekre legyenek

$$w_{ij} := \begin{cases} 1 - p_{ab} & p_{ab} \text{ valószínűséggel} \\ -p_{ab} & 1 - p_{ab} \text{ valószínűséggel} \end{cases} \quad (5.20)$$

független valószínűségi változók; az $a = 1, \dots, k$ egészekre és az $i, j \in V_a$ ($i \leq j$) indexekre pedig legyenek a

$$w_{ij} := \begin{cases} 1 - p_{aa} & p_{aa} \text{ valószínűséggel} \\ -p_{aa} & 1 - p_{aa} \text{ valószínűséggel} \end{cases} \quad (5.21)$$

elemek szintén függetlenek, majd ezeket tükrözzük a diagonálisra úgy, hogy \mathbf{W} szimmetrikus legyen. Ez a \mathbf{W} kielégíti 5.17. Definíció kritériumait, mivel elemei egyenleteasen korlátosak és varianciájuk

$$\sigma^2 = \max_{1 \leq i \leq j \leq k} p_{ij}(1 - p_{ij}) \leq \frac{1}{4}.$$

Ezesetben a véletlen (zajos) $G_n = (V, \mathbf{A}_n)$ gráf egy ún. általánosított véletlen gráf lesz a V_1, \dots, V_k partíción úgy, hogy V_a és V_b csúcsai egymástól függetlenül, p_{ab} valószínűséggel vannak összekötve ($1 \leq a \leq b \leq k$), l. [25, 26, 45, 61, 75]. Ezt a sztochasztikus blokkmodellnek is nevezett modellt először a [39] cikkben vezették be, majd a [20, 49] cikkek szintén tárgyalják. A fenti általánosított véletlen gráfra úgy is tekinthetünk, mint az [31] cikkben bevezetett Erdős–Rényi véletlen gráf általánosítására (az eredeti modell, ami a világ első véletlen gráf modellje volt, az egyklaszteres speciális esetre vonatkozott). A modellt részletesen ismerteti a [18] könyv is.

Majdnem biztos konvergencia állításához az $n \times n$ -es \mathbf{W}_n Wigner-zajra ismert következő koncentrációs egyenlőtlenséget használjuk, l. [3]:

$$\mathbb{P}(|\|\mathbf{W}_n\| - \mathbb{E}(\|\mathbf{W}_n\|)| > t) \leq \exp\left(-\frac{(1 - o(1))t^2}{32K^2}\right),$$

ahol K a \mathbf{W}_n mátrix elemeinek felső korlátja. Ezt összevetve a (5.18)-ból következő $\|\mathbf{W}_n\| = \mathcal{O}(\sqrt{n})$ becsléssel azt kapjuk, hogy $\mathbb{E}\|\mathbf{W}_n\| = \mathcal{O}(\sqrt{n})$, 1-hez tartó valószínűséggel. Ezért vannak olyan c_1, c_2 pozitív valós számok (amelyek nem függnek n -től, csak K -tól), hogy

$$\mathbb{P}(\|\mathbf{W}\| > c_1\sqrt{n}) \leq e^{-c_2n}. \quad (5.22)$$

Miután a jobb oldal egy n -től függő konvergens végtelen sor általános tagja, a Borel–Cantelli lemma miatt \mathbf{W}_n nem csak 1-hez tartó valószínűséggel, hanem majdnem biztosan is \sqrt{n} rendű. Ezt a tényt fogjuk használni a következő tétel megfogalmazásában. Felhasználjuk továbbá, hogy az $n \times n$ -es \mathbf{B} felfűjt mátrix rangja megegyezik a $k \times k$ -as \mathbf{P} mátrix rangjával, az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy ez k . Akkor a \mathbf{B} mátrix nem-nulla sajátértékei, a β_1, \dots, β_k számok, n nagyságrendűek a blokkméretekre tett feltételek mellett.

5.19. Tétel *Legyen \mathbf{B}_n a $k \times k$ -as szimmetrikus \mathbf{P} mátrix felfűjtja, melynek nem-nulla sajátértékei a β_1, \dots, β_k számok, és legyen \mathbf{W}_n $n \times n$ -es Wigner-zaj. Akkor az $\mathbf{A}_n = \mathbf{B}_n + \mathbf{W}_n$ zajos véletlen mátrixnak van olyan $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ sajátértéke, melyekre*

$$|\lambda_i - \beta_i| \leq 2\sigma\sqrt{n} + \mathcal{O}(n^{1/3} \log n), \quad i = 1, \dots, k \quad (5.23)$$

és a többi $n - k$ sajátértékre

$$|\lambda_j| \leq 2\sigma\sqrt{n} + \mathcal{O}(n^{1/3} \log n), \quad j = k + 1, \dots, n \quad (5.24)$$

teljesül majdnem biztosan, ha $n \rightarrow \infty$ a blokkméretekre tett feltételek mellett.

\mathbf{B}_n sajátértékeinek $\Theta(n)$ nagyságrendjét figyelembe véve, az \mathbf{A}_n mátrix k legnagyobb abszolút értékű és a többi sajátértékei közt egy $\Delta - 2\varepsilon$ rés lesz, ahol

$$\varepsilon = 2\sigma\sqrt{n} + \mathcal{O}(n^{1/3} \log n) \quad \text{és} \quad \Delta = \min_{1 \leq i \leq k} |\beta_i|. \quad (5.25)$$

A 5.19. Tétel értelmében az \mathbf{A}_n mátrix tehát rendelkezni fog k kiugró, ún. strukturális sajátértékkel. A [13] cikkben beláttuk, hogy a \mathbf{B}_n mátrix β_1, \dots, β_k sajátértékeihez tartozó sajátvektorok koordinátái megegyeznek a felfűjtásnak megfelelő V_1, \dots, V_k partíció egyes elemein. Jelölje F az ezen szakaszokként konstans vektorok alterét. Azt is beláttuk, hogy az \mathbf{A}_n mátrix $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ strukturális sajátértékeihez tartozó normált sajátvektorok távolsága ettől az altértől $\mathcal{O}(\frac{1}{n})$ rendű, így az ezeken alapuló reprezentációban a csúcsok reprezentánsainak k -varianciája is $\mathcal{O}(\frac{1}{n})$ rendű. Nem-szimmetrikus mátrixokra, ha a véletlen mátrixelemek eloszlása csak első momentumukban tér el, hasonló eredmények találhatók a spektrumra a [43] cikkben.

Hasonló eredmény bizonyítható a normált modularitás ill. Laplace mátrix spektrumára, l. [17]. A tételek lényege az, hogy a fenti jelölésekkel, a \mathbf{A}_n zajos mátrixszal, mint élsúly mátrixszal definiált véletlen gráf normált modularitás mátrixának lesz $k - 1$ sajátértéke, melyek élesen elszeparálódnak 0-tól (egy n -től független konstansnyi távolságban lesznek 0-tól), a többi sajátérték pedig 0 körül torlódik, ha $n \rightarrow \infty$. Az elszeparált strukturális sajátértékekhez tartozó transzformált sajátvektorokkal reprezentálva, a reprezentánsok klaszterei ismét jól elválhatnak. Ekvivalens módon, a normált Laplace mátrixnak lesz k sajátértéke, melyek élesen elszeparálódnak 1-től (beleértve a 0 sajátértéket is), a többiek pedig 1 körül torlódnak, ha $n \rightarrow \infty$, majdnem biztosan.

5.3.2. Reguláris partíciók

Az eddig vizsgált véletlen struktúrákban tehát törvényszerűen jelennek meg a strukturális sajátértékek, a hozzájuk tartozó sajátvektorokkal pedig fel tudjuk tárni a struktúrát. Most annak eredünk a nyomába, hogy determinisztikus gráfokban hogyan lehet az általánosított véletlen gráfokéhoz hasonló struktúrát találni. Egy ilyen struktúrát a klaszterpárok ún. térfogat-regularitásának diszkrepanciájával jellemezünk, amely diszkrepanciát becsülni tudjuk a normált modularitás mátrix kiugró és egyéb sajátértékei közötti réssel és a kiugró sajátértékekhez tartozó sajátvektorokkal történő reprezentáció klasztereinek összvarianciáival.

A $k = 1$ esetre ismeretes az ún. Expander Mixing Lemma, l. [22, 40], melynek súlyozott gráfokra való átfogalmazása [15]-ben található:

5.20. Tétel *Legyen $G = (V, W)$ súlyozott gráf, melyre $\text{Vol}(V) = 1$. Akkor minden $X, Y \subset V$ csúcshalmaz párra*

$$|w(X, Y) - \text{Vol}(X)\text{Vol}(Y)| \leq \|\mathbf{M}_D\| \cdot \sqrt{\text{Vol}(X)\text{Vol}(Y)},$$

ahol $\|\mathbf{M}_D\|$ a G gráf normált modularitás mátrixának spektrálnormája.

A [23] cikkben a 'kis' diszkrepanciát (\mathbf{M}_D spektrálnormáját), mint kvázirandom tulajdonságot tárgyalják. Ez azt jelenti, hogy a gráf egy véletlen gráf tulajdonságait hordozza. A többosztályos esetre az általánosított kvázirandom gráfok definíciója a [57] cikkben található.

Most a többklasztteres esetet vizsgáljuk, mikoris \mathbf{M}_D 'nagy', de van néhány nagy abszolút értékű, a többitől élesen elszeparálódó sajátérték. Ebből a célból bevezetjük a klaszterpárok térfogatregularitásának fogalmát [4] cikk alapján. A szerzők ugyancsak adak egy algoritmust, mely kiszámolja egy – néha ritka – gráf csúcsainak reguláris partícióját n -ben polinom időben, ezzel mintegy konstrukciót adva a Szemerédi Regularitási Lemmára ([79]).

5.21. Definíció *Legyen $G = (V, W)$ súlyozott gráf, melyre $\text{Vol}(V) = 1$. Az $A, B \subseteq V$ diszjunkt pár α -térfogat reguláris, ha minden $X \subset A, Y \subset B$ részhalmazra*

$$|w(X, Y) - \rho(A, B)\text{Vol}(X)\text{Vol}(Y)| \leq \alpha \sqrt{\text{Vol}(A)\text{Vol}(B)},$$

ahol $\rho(A, B) = \frac{w(A, B)}{\text{Vol}(A)\text{Vol}(B)}$ az (A, B) pár közti élsűrűség.

α 'kis' értéke azt jelenti, hogy az (A, B) pár ún. páros expander, melyet [2] és [21] cikkek vezettek be.

[15]-ben bebizonyítottuk, hogy a $k = 2$ esetben, amennyiben a normált modularitás mátrix egyetlen sajátértéke ugrik ki a 0 környezetéből, akkor a hozzá tartozó sajátvektor koordinátái alapján klaszteresítve, a kapott két klaszter ilyen reguláris párt alkot, ahol α -t a klaszterek 2-varianciájával becsüljük. Általános k -ra a következő tételt bizonyítottuk [17]-ben.

5.22. Tétel Legyen $G = (V, \mathbf{W})$ súlyozott gráf n csúccsal, és d_1, \dots, d_n általánosított fokokkal, melyek a \mathbf{D} foksám mátrix diagonális elemei. Tegyük fel, hogy G összefüggő, $\text{Vol}(V) = 1$, és nincsenek domináns csúcsok: $d_i = \Theta(1/n)$, $i = 1, \dots, n$, ha $n \rightarrow \infty$. Legyenek G normált modularitás mátrixának sajátértékei

$$1 \geq |\mu_1| \geq \dots \geq |\mu_{k-1}| > \varepsilon \geq |\mu_k| \geq \dots \geq |\mu_n| = 0.$$

A V csúcshalmaz (V_1, \dots, V_k) partíciója olyan, hogy minimalizálja azt az $s^2 = S_k^2(\mathbf{r}_1^*, \dots, \mathbf{r}_n^*)$ -el jelölt súlyozott k -varianciát, melyet az optimális $(k-1)$ -dimenziós reprezentánsok k klaszterbe sorolásával kapunk. (Ezek a reprezentánsok a $(\mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{D}^{-1/2}\mathbf{u}_{k-1})$ mátrix sorvektorai, ahol $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k-1}$ a μ_1, \dots, μ_{k-1} sajátértékekhez tartozó ortonormált sajátvektorok.) Tegyük fel, hogy van olyan $0 < K \leq \frac{1}{k}$ konstans, mellyel $|V_i| \geq Kn$, $i = 1, \dots, k$. Akkor a (V_i, V_j) párok $\mathcal{O}(\sqrt{2ks} + \varepsilon)$ -térfogat regulárisak, ha $i \neq j$; az $i = j$ esetben pedig a V_i ($i = 1, \dots, k$) klaszterekre teljesül, hogy tetszőleges $X, Y \subset V_i$ részhalmazokra

$$|w(X, Y) - \rho(V_i)\text{Vol}(X)\text{Vol}(Y)| = \mathcal{O}(\sqrt{2ks} + \varepsilon)\text{Vol}(V_i),$$

ahol $\rho(V_i) = \frac{w(V_i, V_i)}{\text{Vol}^2(V_i)}$ a V_i csúcsklaszter belső élsűrűsége.

5.4. Algoritmusok gráfok és hipergráfok klaszterezésére

5.4.1. Súlyozott gráfok

Itt az \mathbf{M}_D normált modularitás mátrix

$$1 \geq |\mu_1| \geq |\mu_2| \geq \dots \geq |\mu_n| = 0$$

csökkenő abszolút értékű sajátértékei alapján klaszterezünk. A klaszterek k számát egy olyan pozitív egésznek választjuk, melyre szignifikáns rés tapasztalható μ_{k-1} és μ_k közt (ha ilyen nincs, akkor legyen k egy viszonylag kis szám, esetleg $k = 2$ vagy $k = 3$, ha szemléletesen szeretnénk megjeleníteni a klasztereket 2- vagy 3-dimenziós ábrákon).

Speciálisan, ha a $k-1$ legnagyobb abszolút értékű sajátérték mind pozitív, akkor olyan klaszterekre számíthatunk, melyeken belül nagy, a klaszterek közt pedig kicsi az élsűrűség. Az ellenkező esetben, ha a $k-1$ legnagyobb abszolút értékű sajátérték mind negatív, akkor olyan klaszterekre számíthatunk, melyeken belül kicsi, a klaszterek közt pedig nagy az élsűrűség. Az általános esetben pedig csak olyan klaszterekre számíthatunk, melyekben mind a klasztereken belül, mind a klaszterek közt homogén az élsűrűség, és a klaszterpárok közti diszkrepancia (a térfogat regularitás konstansa) kicsi.

Az algoritmus pszeudokódja a következő: **Input:** Az $n \times n$ -es \mathbf{W} mátrix és a klaszterek száma (k), amiről előzetesen tájékozódunk.

1. Kiszámoljuk a \mathbf{d} foksám-vektort, a \mathbf{D} foksám-mátrixot és az $\mathbf{M}_D = \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{W} \mathbf{D}^{-1/2} - \sqrt{\mathbf{d}} \sqrt{\mathbf{d}}^T$ normált modularitás mátrixot.
2. Kiszámoljuk ennek $k - 1$ legnagyobb abszolút értékű sajátértékét és az azokhoz tartozó $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k-1}$ sajátvektorokat.
3. Meghatározzuk a csúcsok $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n \in \mathbb{R}^{k-1}$ reprezentánsait, mint a

$$(\mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{u}_{k-1})$$

mátrix sorvektorait.

4. A súlyozott k -középeljárással az $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ pontokat k klaszterbe soroljuk.

Output: a csúcsok ennek megfelelő V_1, \dots, V_k klaszterei.

Nagyméretű mátrixok strukturális sajátértékeinek meghatározására gyors közelítő eljárások léteznek, l. [33, 36]. Az fentiekben használt súlyozott k -közép eljárás pszeudokódja pedig a következő. **Input:** a véges dimenziós $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$ pontok és a d_1, \dots, d_n pozitív súlyok.

- Inicializálás: V_1, \dots, V_k a pontok kezdeti klaszterei.
- Az iteráció:
 1. Kiszámoljuk a klaszter-középpontokat:

$$\mathbf{c}_i = \frac{1}{\text{Vol}(V_i)} \sum_{j \in V_i} d_j \mathbf{r}_j, \quad i = 1, \dots, k.$$

2. Áthelyezzük a pontokat a klaszterek közt: \mathbf{r}_j abba a V_i klaszterbe kerül, melyre $\|\mathbf{r}_j - \mathbf{c}_i\| = \min_{\ell} \|\mathbf{r}_j - \mathbf{c}_{\ell}\|$. (Ha ez több indexre is teljesül, a legkisebbet válsztjuk.)

Az új klaszterekkel megismételjük az 1-2 lépéseket konvergenciáig (amíg a pontok stabilizálódnak a klaszterekben).

Output: a pontok V_1, \dots, V_k klaszterei.

Megjegyezzük, hogy néha eleve metrikus térbeli adatpontokat szeretnénk klaszteresíteni. Ilyenkor is alkalmazhatjuk a fenti, gráfokra vonatkozó módszert úgy, hogy az \mathbf{x}_i pontokat egy gráf csúcsainak tekintjük, és a pontok páronkénti távolságai alapján meghatározzuk azok w_{ij} hasonlóságait, melyeket a \mathbf{W} élsúly mátrix elemei lesznek. A

4.4. Fejezet ötletet ad ahhoz, hogy reprodukáló magú Hilbert-tér technikákkal hogyan lehet ezt megvalósítani. Gyakran az ún. Gauss magfüggvényt használjuk, mellyel

$$w_{ij} = K_{\text{Gauss}}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = e^{-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2}},$$

ahol $\sigma > 0$ paraméter, l. [60]. A módszert képfelismerésre is alkalmazzák, amikor is a pontok pixeleknak felelnek meg, koordinátáik pedig nem csak a pixel térbeli elhelyezkedésére jellemzők, hanem azok színére, textúrájára, stb., l. [78].

5.4.2. Hipergráfok kétszemponútú klaszterezése

Mintául a v_1, v_2, \dots, v_n bináris (0–1) változókra tett e_1, e_2, \dots, e_m megfigyelések szolgálnak ($n \ll m$). Ezek a $H = (V, E)$ hipergráfot alkotják, ahol $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ és $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$, $\mathcal{I}(v \in e)$ pedig 1 vagy 0 aszerint, hogy az e objektumon a v tulajdonságot megfigyelték-e vagy sem.

Legyen $E' \subset E$ egy részminta, amely a $H' = (V, E')$ hipergráfot generálja. Jelölje $0 = \lambda_1(H') \leq \lambda_2(H') \leq \dots \leq \lambda_n(H')$ a H' hipergráf Laplace mátrixának spektrumát és az $n \times n$ -es $\mathbf{X}^*(H')$ mátrix tartalmazza soraiban a hozzájuk tartozó teljes ortonormált sajátvektorrendszert. Az 5.4. Reprezentációs Tétel szerint bármely d egészre ($1 \leq d \leq n$) a $d \times n$ -es $\mathbf{X}_d^*(H')$ mátrix, amely $\mathbf{X}^*(H')$ első d sorát tartalmazza, a H' hipergráf optimális d -dimenziós reprezentációját adja. Az E' -beli élek összvarianciája ebben a reprezentációban

$$L(\mathbf{X}_d^*(H')) = \sum_{e \in E'} L(e, \mathbf{X}_d^*(H')) = \sum_{j=1}^d \lambda_j(H').$$

A H' hipergráf beágyazásának költségét a

$$K(H') := \min_{d \in \{1, \dots, n\}} [c2^{n-d} + L(\mathbf{X}_d^*(H'))]$$

célfüggvénnyel definiáljuk, ahol a c konstans előre választjuk meg (a probléma méretének megfelelően), és a $c2^{n-d}$ tag a túlságosan nagy dimenziókat bünteti (az élek összvarianciáját kifejező $L(\mathbf{X}_d^*(H'))$ tag – épp ellenkezőleg – a dimenzió növelésével csökkenthető). A minimumot adó d^* dimenziót az E' *él-klaszter dimenziójának* nevezzük.

Jelölje \mathcal{S} az E élhalmaz összes lehetséges partícióit. Keressük azt az $S \in \mathcal{S}$ partíciót, melyre a $K = \sum_i K(H_i)$ célfüggvény minimális, ahol $H_i = (V, E_i)$. Most válasszunk és rögzítsünk egy k egészet ($1 \leq k \leq n$). Definiálunk egy iterációt, amely a fenti célfüggvény egy relatív minimumához vezet, ha csak az \mathcal{S}_k -val jelölt k -partíciók körében keressük a minimumot. Legyen tehát $(E_1, \dots, E_k) \in \mathcal{S}_k$ az E élhalmaz egy k -partíciója. Az előző jelöléseket alkalmazva az indukált $H_i = (V, E_i)$, ($i = 1, \dots, k$) rész-hipergráfokra a

$$Q_{d_i}(H_i) := c2^{n-d_i} + L(\mathbf{X}_{d_i}^*(H_i)), \quad (i = 1, \dots, k)$$

jelöléseket bevezetve, a $Q = \sum_{i=1}^k Q_{d_i}(H_i)$ költségfüggvényt fogjuk minimalizálni a \mathcal{S}_k -beli partíciók és a d_1, \dots, d_k dimenziók körében.

A minimumot kereső iteráció a következő lépésekből áll:

0. Kiindulásul tekintjük az E élhalmaz tetszőleges E_1, \dots, E_k partícióját (egy ilyen nyerhetünk pl. a k -közép módszerrel).
1. Az E_1, \dots, E_k klasztereket rögzítve: meghatározzuk a $H_i = (V, E_i)$ hipergráfok Laplace mátrixainak spektrálfelbontását. Ezután $Q_{d_i}(H_i)$ -t a d_i dimenzióban minimalizáljuk (minden i -re külön). Mivel $1 \leq d_i \leq n$ egész, ez egy diszkrét minimalizálási feladat. Jelölje d_i^* a minimumot adó (nem feltétlenül egyértelmű) dimenziót, amellyel tehát

$$Q_{d_i^*}(H_i) = c2^{n-d_i^*} + \sum_{j=1}^{d_i^*} \lambda_j(H_i) \quad (i = 1, \dots, k).$$

2. Most a d_i^* -dimenziókat rögzítve az objektumokat átsoroljuk a klaszterek közt: az e objektumot abba az E_i klaszterbe helyezzük, amelyben a hozzá tartozó $L(e, \mathbf{X}_{d_i^*}^*(H_i))$ variancia minimális (ha több klaszterre is minimális, akkor vegyük a legkisebb ilyen i -t). Az objektumok így nyert új klaszteresítését E_1^*, \dots, E_k^* -gal jelölve, ezekkel megismételjük az 1. és 2. lépéseket, amíg csak Q csökkenthető.

Triviális, hogy a fenti lépések Q értékét csökkentik, s mivel az objektumok száma véges, az algoritmus véges lépésben Q relatív minimumához vezet.

Bevezethetnénk egy k -ban minimalizáló lépést is, így azonban az algoritmus nagyon hosszadalmas lenne. Inkább végigcsináljuk néhány kiválasztott k -ra (pl. a k -közép eljárást lefuttatva kaphatunk k -ra ötletet), és összehasonlítjuk a minimumként kapott Q értékeket.

Az iteráció során kiürülhetnek, és általában ki is ürülnek él-klaszterek. k értéke természetesen ezzel csökken. A $H_i = (V, E_i)$ hipergráfok általában nem összefüggőek, hanem tartalmaznak izolált csúcsokat, melyeket több 0 sajátérték megléte jelez. Jelölje V_i a nem izolált csúcsok halmazát. Ekkor $\cup_{i=1}^k V_i = V$, de a V_1, \dots, V_k rendszer nem feltétlenül diszjunkt. Ezek a diszjunkt él-klaszterekre jellemző tulajdonság-asszociációkat tartalmazzák.

5.5. Irodalom jegyzék

Irodalomjegyzék

- [1] Alon, N., Milman, V. D., λ_1 , isoperimetric inequalities for graphs and superconcentrators. *J. Comb. Theory Ser. B* **38** (1985), 73–88.
- [2] Alon, N., Eigenvalues and expanders, *Combinatorica* **6** (2) (1986), 83–96.
- [3] Alon, N., Krivelevich, M., Vu, V. H., On the concentration of eigenvalues of random symmetric matrices, *Isr. J. Math.* **131** (2002), 259–267.
- [4] Alon, N., Coja-Oghlan, A., Han, H., Kang, M., Rödl, V., Schacht, M., Quasi-randomness and algorithmic regularity for graphs with general degree distributions, *Siam J. Comput.* **39** (2010), 2336–2362.
- [5] Alpert, C. J., Yao, S.-Z., Spectral partitioning: the more eigenvectors, the better. In *Proc. 32nd ACM/IEEE International Conference on Design Automation* (Preas BT, Karger PG, Nobandegani BS and Pedram M eds) (1995), pp. 195–200. Association of Computer Machinery, New York.
- [6] Azran, A., Ghahramani, Z., Spectral methods for automatic multiscale data clustering. In *Proc. IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR 2006)*, New York NY (Fitzgibbon A, Taylor CJ and Lecun Y eds) (2006), pp. 190–197. IEEE Computer Society, Los Alamitos, California.
- [7] Ballester, C., Calvó-Armengol, A., Zenou, Y., Who’s who in networks. Wanted: The key player, *Econometrica* **74** (5) (2006), 1403–1417.
- [8] Biggs, N. L., Algebraic Graph Theory. Cambridge Univ. Press, Cambridge (1974).
- [9] Bolla, M., Spectra and Euclidean representation of hypergraphs, *Discret. Math.* **117** (1993), 19–39.
- [10] Bolla, M., Tusnády, G., Spectra and Optimal Partitions of Weighted Graphs, *Discret. Math.* **128** (1994), 1–20.

- [11] Bolla, M., M.-Sáska, G., Isoperimetric properties of weighted graphs related to the Laplacian spectrum and canonical correlations, *Stud. Sci. Math. Hung.* **39** (2002), 425–441.
- [12] Bolla, M., M.-Sáska, G., Optimization problems for weighted graphs and related correlation estimates, *Discret. Math.* **282** (2004), 23–33.
- [13] Bolla, M., Recognizing linear structure in noisy matrices, *Lin. Alg. Appl.* **402** (2005), 228–244.
- [14] Bolla, M., Krámlí, A., Statisztikai következtetések elmélete. Typotex, Budapest (2005,2012).
- [15] Bolla, M., Beyond the expanders, *Int. J. Comb.* (2011), 787596.
- [16] Bolla, M., Penalized versions of the Newman–Girvan modularity and their relation to multi-way cuts and k-means clustering. *Phys. Rev. E* **84** (2011), 016108.
- [17] Bolla, M., Spectra and structure of weighted graphs, *Electronic Notes in Discrete Mathematics* **38** (2011), 149–154.
- [18] Bollobás, B., Random Graphs, 2nd edn. Cambridge Univ. Press, Cambridge (2001).
- [19] Cheeger, J., A lower bound for the smallest eigenvalue of the Laplacian. In *Problems in Analysis* (ed. R. C. Gunning) (1970), pp. 195–199. Princeton Univ. Press, Princeton NJ.
- [20] Choi, D. S., Wolfe, P. J., Airolidi, E. M., Stochastic blockmodels with growing number of classes, *Biometrika* **99** (2) (2012), 273–284.
- [21] Chung, F., Spectral Graph Theory. CBMS Regional Conference Series in Mathematics **92**. American Mathematical Society, Providence RI (1997).
- [22] Chung, F., Graham, R. L., Wilson, R. K., Quasi-random graphs, *Combinatorica* **9** (1989), 345–362.
- [23] Chung, F., Graham, R., Quasi-random graphs with given degree sequences, *Random Struct. Algorithms* **12** (2008), 1–19.
- [24] Clauset, A., Newman, M. E. J., Moore, C., Finding community structure in very large networks. *Phys. Rev. E* **70** (2004), 066111.
- [25] Coja-Oghlan, A., Lanka, A., Finding planted partitions in random graphs with general degree distributions, *J. Discret. Math.* **23** (4) (2009), 1682–1714.

- [26] Coja-Oghlan, A., Graph partitioning via adaptive spectral techniques, *Combin. Probab. Comput.* **19** (2) (2010), 227–284.
- [27] Cvetković, D. M., Doob, M., Sachs, H., Spectra of Graphs. Academic Press, New York (1979).
- [28] Diaconis, P., Stroock, D., Geometric bounds for eigenvalues of Markov chains, *Ann. Appl. Probab.* **1** (1991), 36–62.
- [29] Ding, C., He, X., Zha, H., Gu, M., Simon, H. D., A minmax cut spectral method for data clustering and graph partitioning. Technical Report 54111, Lawrence Berkeley National Laboratory (2003).
- [30] Duch, J., Arenas, A., Community detection in complex networks using extremal optimization, *Phys. Rev. E* **72** (2005), 027104.
- [31] Erdős, P., Rényi, A., On the evolution of random graphs, *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.* **5** (1960), 17–61.
- [32] Fiedler, M., Algebraic connectivity of graphs, *Czech. Math. J.* **23** (98) (1973), 298–305.
- [33] Frieze, A., Kannan, R., Quick approximation to matrices and applications, *Combinatorica* **19** (2) (1999), 175–220.
- [34] Füredi, Z., Komlós, J., The eigenvalues of random symmetric matrices, *Combinatorica* **1** (1981), 233–241.
- [35] Fortunato, S., Community detection in graphs, *Phys. Rep.* **486** (2010), 75–174.
- [36] Golub, G. H., Van Loan, C. F., Matrix Computations, 3rd edn. Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD (1996).
- [37] Hoffman, A. L., The change in the least eigenvalue of the adjacency matrix of a graph under imbedding, *SIAM J. Appl. Math.* **17** (1969), 664–671.
- [38] Hoffman, A. J., Eigenvalues and partitionings of the edges of a graph, *Linear Algebra Appl.* **5** (1972), 137–146.
- [39] Holland, P., Laskey, K. B., Leinhardt, S., Stochastic blockmodels: some first steps, *Social Networks* **5** (1983), 109–137.
- [40] Hoory, S., Linial, N., Wigderson, A., Expander graphs and their applications, *Bull. Amer. Math. Soc. (N. S.)* **43** (4) (2006), 439–561.

- [41] Jackson, M. O., Zenou, Y., Games on Networks. Megjelenés előtt: *Handbook of Game Theory* **4** (Young, P. and Zamir, S. eds), Elsevier Science.
- [42] Juhász, F., Mályusz, K., Problems of cluster analysis from the viewpoint of numerical analysis. In *Numerical Methods, Coll. Math. Soc. J. Bolyai* (ed. Rózsa P), Vol 22 (1980), pp. 405–415. North-Holland, Amsterdam.
- [43] Juhász, F., On the structural eigenvalues of block random matrices, *Linear Algebra Appl.* **246** (1996), 225–231.
- [44] Kannan, R., Vempala, S., Vetta, A., On clusterings: Good, bad and spectral, *J. ACM* **51** (2004), 497–515.
- [45] Karrer, B., Newman, M. E. J., Stochastic blockmodels and community structure in networks, *Phys. Rev. E* **83** (2011), 016107.
- [46] Kelmans, A. K., Properties of the characteristic polynomial of a graph. *Cibernetics in the Science of Communication* **4**, Energija, Moskva–Leningrad (1967), 27–41 (oroszul).
- [47] Komlós, J., Shokoufanden, A., Simonovits, M., Szemerédi, E., Szemerédi’s Regularity Lemma and Its Applications in Graph Theory. In *Lecture Notes in Computer Science*, Vol 2292 (2002), pp. 84–112. Springer, Berlin.
- [48] Lee, J. R., Gharan, S. O., Trevisan, L., Multi-way spectral partitioning and higher-order Cheeger inequalities. In *Proc. 44th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC 2012)* (2012), pp. 1117–1130. New York NY.
- [49] Leskovec, J., Lang, K. I., Dasgupta, A., Mahoney, M. W., Community structure in large networks: natural cluster sizes and the absence of well-defined clusters, *Internet Math.* **6** (1) (2009), 29–123.
- [50] Liotta, G. ed., Graph drawing. *Lecture Notes in Computer Science* **2912**. Springer (2004).
- [51] Louis, A., Raghavendra, P., Tetali, P., Vempala, S., Algorithmic extension of Cheeger’s inequality to higher eigenvalues and partitions. In *Approximation, Randomization and Combinatorial Optimization. Algorithms and Techniques. Lecture Notes in Computer Science* (Goldborg LA, Jansen K, Ravi R and Rolim JDP eds), Vol. 6845 (2011), pp 315–326. Springer.
- [52] Louis, A., Raghavendra, P., Tetali, P., Vempala, S., Many sparse cuts via higher eigenvalues. In *Proc. 44th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC 2012)* (2012), pp. 1131–1140. New York NY.

- [53] Lovász, L., Kombinatorikai problémák és feladatok. Typotex, Budapest (2000).
- [54] Lovász, L., Random walks on graphs: a survey. In *Combinatorics, Paul Erdős is Eighty. János Bolyai Society, Mathematical Studies* Vol. 2 (1993), pp. 1–46. Keszthely, Hungary.
- [55] Lovász, L., Winkler, P., Exact mixing in an unknown Markov chain, *Electron. J. Comb.* **2**, paper R15 (1995), 1–14.
- [56] Lovász, L., Simonovits, M., Random walks in a convex body and an improved volume algorithm, *Random Struct. Algorithms* **4** (1993), 359–412.
- [57] Lovász, L., T.-Sós, V., Generalized quasirandom graphs, *J. Comb. Theory B* **98** (2008), 146–163.
- [58] Lubotzky, A., Discrete graphs, expanding graphs, and invariant measures. (With an appendix by J. D. Rogawski). In *Progress in Mathematics* **125**, Birkhäuser Verlag, Basel (1994).
- [59] Von Luxburg, U., A tutorial on spectral clustering, *Stat. Comput.* **17** (2006), 395–416.
- [60] Von Luxburg, U., Belkin, M., Bousquet, O., Consistency of spectral clustering, *Ann. Stat.* **36** (2008), 555–586.
- [61] McSherry, F., Spectral partitioning of random graphs. In *Proc. 42nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS 2001)* (2001), pp. 529–537. Las Vegas, Nevada.
- [62] Meila, M., Shi, J., Learning segmentation by random walks. In *Proc. 13th Neural Information Processing Systems Conference (NIPS 2001)* (Leen TK, Dietterich TG and Tresp V eds) (2001), pp. 873–879. MIT Press, Cambridge, USA.
- [63] Mohar, B., Isoperimetric inequalities, growth and the spectrum of graphs, *Linear Algebra Appl.* **103** (1988), 119–131.
- [64] Mohar, B., Isoperimetric numbers of graphs, *J. Comb. Theor, Ser. B* **47** (1989), 274–291.
- [65] Mohar, B., Poljak, S., Eigenvalues and the max-cut problem, *Czech. Math. J.* **40** (1990), 343–352.
- [66] Mohar, B., The Laplacian spectrum of graphs. In *Graph Theory, Combinatorics, and Applications* Vol 2 (Alavi Y, Chartrand G, Oellermann OR and Schwenk AJ eds) (1991), pp. 871–898. Wiley.

- [67] Newman, M. E. J., Girvan, M., Finding and evaluating community structure in networks, *Phys. Rev. E* **69** (2004), 026113.
- [68] Newman, M. E. J., Detecting community structure in networks, *Eur. Phys. J. B* **38** (2004), 321–330.
- [69] Newman, M. E. J., Fast algorithm for detecting community structure in networks, *Phys. Rev. E* **69** (2004), 066133.
- [70] Newman, M. E. J., Finding community structure in networks using the eigenvectors of matrices, *Phys. Rev. E* **74** (2006), 036104.
- [71] Newman, M. E. J., Networks, An Introduction. Oxford University Press (2010).
- [72] Ng, A. Y., Jordan, M. I., Weiss, Y., On spectral clustering: analysis and an algorithm. In *Proceedings of the 14th Neural Information Processing Systems Conference, NIPS 2001* (Dietterich TG, Becker S and Ghahramani Z eds) (2001), pp. 849–856. MIT Press, Cambridge, USA.
- [73] Pisanski, T., Shawe-Taylor, J., Characterizing graph drawing with eigenvectors, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **40** (2000), 567–571.
- [74] Pólya, G., Szegő, S., Isoperimetric inequalities in mathematical physics, *Ann. Math. Studies* **27** (1951), Princeton University Press.
- [75] Rohe, K., Chatterjee, S., Yu, B., Spectral clustering and the high-dimensional stochastic blockmodel. *Ann. Stat.* **39** (4) (2011), 1878–1915.
- [76] Simonovits, M., T.-Sós, V., Szemerédi’s partition and quasi-randomness, *Random Struct. Algorithms* **2** (1991), 1–10.
- [77] Sinclair, A., Jerrum, M., Approximate counting, uniform generation and rapidly mixing Markov chains, *Inf. Comput.* **82** (1989), 93–133.
- [78] Shi, J., Malik, J., Normalized cuts and image segmentation, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* **22** (8) (2000), 888–905.
- [79] Szemerédi, E., Regular partitions of graphs. In *Colloque Inter. CNRS. No. 260, Problèmes Combinatoires et Théorie Graphes* (Bermond J-C, Fournier J-C, Las Vergnas M and Sotteau D eds) (1976), pp. 399–401.
- [80] Telcs, A., The Art of Random Walks. Lecture Notes in Mathematics 1885, Springer (2006).
- [81] Tetali, P., Random walks and effective resistance of networks, *J. Theor. Probab.* **1** (1991), 101–109.

- [82] Thomassen, C., Resistances and currents in infinite electrical networks, *J. Comb. Theory* **49** (1990), 87–102.
- [83] Trevisan, L., Max cut and the smallest eigenvalue. In *Proc. 41th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC 2009)* (2009), pp. 1117–1130. Bethesda, Maryland USA.

6. fejezet

Dinamikus faktoranalízis

*„Semmi sem áll, de keringve, forogva
Mozog minden az égen s egek alatt.
S mi húzza, mi hajtja,
Nem szűnik az ok:
Nincs nyugalom, minden mozog.”
(Giordano Bruno: Dialógusok)*

Egy iterációs algoritmust ismertetünk a paraméterek becslésére az alább bevezetendő dinamikus faktoranalízis modellben adott faktorszám mellett, ahol a faktorfolyamat autoregressziós sémát követ. A belső ciklusban végrehajtott ún. kompromisszum faktor felbontás inhomogén kvadratikus alakok összegének maximalizálására önmagában is érdekes, ezért ezt külön részben tárgyaljuk, mint a főkomponensanalízis messzemenő általánosítását. Egy alkalmazást is bemutatunk makrogazdasági mutatók éves idősoraira Magyarországon (a rendszerváltástól kezdve).

6.1. Előzmények és célkitűzések

A faktoranalízis klasszikus modelljének ismeretét feltételezzük, a részletes leírás megtalálható pl. [1]-ban. A klasszikus faktoranalízis sokváltozós statikus adatrendszerben a változók számának csökkentésére alkalmas azáltal, hogy a sok, sztochasztikusan összefüggő változót kevesebb függetlennel, ún. faktorokkal írja le, melyek azért a változók közti összefüggések nagy részét magyarázzák. A dinamikus faktoranalízis célkitűzése hasonló, de többváltozós idősorokkal foglalkozik, így a faktorok is idősorok lesznek. Az első dinamikus faktormodell megalkotása Geweke [10] és Denton [9] cikkéhez fűződik az 1970-es évek végén. Ezt a modellt az 1980-as évek elején nálunk az akkori Tervhivatalban már alkalmazták is az 1953-1979 közti makrogazdasági mutatók idősorára. Bánkóvi és társ-szerzői az [1, 2] cikkekben tovább is fejlesztették a modellt. Mivel a faktorfolyamatokat autoregressziós modell írja le, a faktoranalízis technikái mellett a regreszióanalízisére is

szükség volt. Azóta rengeteg dinamikus faktoranalízis modell látott napvilágot, különösen az ezredforduló után, mikor a gazdasági válságfolyamatok pontosabb előrejelzést tettek szükségessé. A dinamikus faktormodell az autoregressziós sémával képes előrejelezni a faktorfolyamatot, és így – a faktorsúlyok alapján – magukat a változókat is.

Modellünkben a sokváltozós idősor (egymással összefüggő makrogazdasági mutatók ekvidisztans időpontokban megfigyelve) leírására jóval kevesebb, fix számú faktort használunk, melyek autoregressziós folyamattal történő leírása alkotja a modell dinamikus részét. A modell alapvető elképzelése az, hogy a változók minden egyes időpontban a faktorok lineáris kombinációi, zajtól eltekintve. Az együtthatók (faktorsúlyok) alapján így a faktorokkal együtt a változók is előrejelezhetők. Maguknak a faktoroknak csak a szakemberek tudnak konkrét jelentést tulajdonítani, akárcsak a klasszikus faktoranalízisben. A konkrét példában mi is kísérletet teszünk erre.

A paraméterbecslésre különböző módszerek használatosak. A [11] cikkben maximum likelihood becslést alkalmaznak, míg Deistler és társszerzői a [7, 8] cikkekben lineáris algebrai módszereket, autoregressziós sémát és egyedi (idiosyncratic) hibatagot használnak. A már említett [1, 2] cikkben a szerzők egy iterációs eljárást fejlesztettek ki, melyben egymás után választották le a dinamikus faktorokat. Módszerük a [6] cikkben bevezetett, ún. kanonikus változótranszformációkon alapult. A faktorok egyszerre történő meghatározása egy technikai nehézségbe ütközött: inhomogén kvadratikus alakok összegének optimalizálását kellett megoldani, melyre csak az 1990-es években született algoritmus, melynek leírása a [3] cikkben található.

Itt az [1, 2] algoritmus [3] alapján továbbfejlesztett változatot ismertetünk, melyben egyszerre (nem pedig egymás után) vonjuk ki a dinamikus faktorokat (ennek egy akkori alkalmazását tárgyalja a [5] cikk). Inputként a megfigyelések n -dimenziós véletlen vektora szolgál a t_1 és t_2 közti ekvidisztans időpontokban (esetünkben években). Megjegyezzük, hogy n nem feltétlenül kell, hogy nagyobb legyen $(t_2 - t_1 + 1)$ -nél, l. [12]. Adott $k < n$ egészre (k általában jóval kisebb, mint n) k korrelálatlan faktort választunk le, melyek lefutása a lineáris és autoregressziós sémát követi. Az utóbbiba beépített késleltetést szintén meg kell adni (esetünkben 4 év, de ez csökkenthető). A paraméterek becslésére egy kvadratikus célfüggvényt minimalizálunk, a faktorok ortogonalitására, varianciájára, és bizonyos – a statikus és dinamikus rész közti arányt meghatározó – súlyokra tett kényszerfeltételek mellett.

A 6.2. paragrafusban definiáljuk a modellt, míg a 6.3. részben a paraméterbecslést tárgyaljuk. A belső ciklusban használt, SVD alapú mátrixfelbontást a 6.4, az alkalmazásokat pedig az 6.5. paragrafusban vezetjük be.

6.2. A modell

Az input adatok n -dimenziós megfigyelések: $\mathbf{y}(t) = (y_1(t), \dots, y_n(t))$, ahol t az idő, és a folyamatot diszkrét, ekvidisztans időpontokban figyeljük meg a $t_1 < t_2$ határok közt ($t =$

t_1, \dots, t_2). Adott k pozitív egész mellett ($k < n$) olyan, minden időpontban korrelálatlan $f_1(t), \dots, f_k(t)$ faktorokat keresünk, melyek kielégítik a következő modellegyenleteket.

1. Az első a lineáris modellekben megszokott

$$f_m(t) = \sum_{i=1}^n b_{im} y_i(t), \quad t = t_1, \dots, t_2; \quad m = 1, \dots, k \quad (6.1)$$

egyenlet, ahol a b_{im} együtthatók a modell paraméterei.

2. A második a faktorok dinamikus egyenlete:

$$\hat{f}_m(t) = c_{m0} + \sum_{j=1}^{\ell} c_{mj} f_m(t-j), \quad t = t_1 + \ell, \dots, t_2; \quad m = 1, \dots, k, \quad (6.2)$$

ahol az ℓ késleltetés adott pozitív egész, $\hat{f}_m(t)$ pedig az m -edik faktor ℓ -edrendű autoregressziós előrejelzése a t időpontban (az egyszerűség kedvéért a fehér-zaj tagot nem tüntetjük fel, ezért használjuk a \hat{f}_m jelölést f_m becslésére). A c_{mj} együtthatók ismét a modell paraméterei.

3. A harmadik egyenlet a változók lineáris előrejelzése a faktorokkal:

$$\hat{y}_i(t) = d_{0i} + \sum_{m=1}^k d_{mi} f_m(t), \quad t = t_1, \dots, t_2; \quad i = 1, \dots, n. \quad (6.3)$$

(A hibatagokat szintén elhagytuk, ezért használjuk az \hat{y}_i jelölést y_i becslésére.) Itt a d_{mi} együtthatók lesznek a modell paraméterei.

Célunk a modell paramétereinek becslése, melyeket az alábbi mátrixokban foglalunk össze: $\mathbf{B} = (b_{im})$, $\mathbf{C} = (c_{mj})$, $\mathbf{D} = (d_{mi})$ ($m = 1, \dots, k$; $i = 1, \dots, n$; $j = 1, \dots, \ell$) (a c_{m0} és d_{0i} paraméterek kifejezhetők az előbbiekkal). A paraméterek becslésének azokat az értékeket fogadjuk el, melyek minimalizálják a

$$w_0 \cdot \sum_{m=1}^k \text{Var}_{\ell}(f_m - \hat{f}_m) + \sum_{i=1}^n w_i \cdot \text{Var}(y_i - \hat{y}_i) \quad (6.4)$$

kvadratikusan célfüggvényt a faktorok ortogonalitására és varianciájára tett alábbi feltételek mellett:

$$\text{Cov}(f_m, f_h) = 0, \quad m \neq h; \quad \text{Var}(f_m) = v_m, \quad m = 1, \dots, k. \quad (6.5)$$

Fontos, hogy (6.4)-ben az alsó indexbeli ℓ azt jelenti, hogy a variancia számolásához csak a $t_1 + \ell, \dots, t_2$ időszakot vesszük figyelembe. Itt a w_0, w_1, \dots, w_n adott, nem-negatív konstansok balanszíroznak a célfüggvény dinamikus és statikus része közt, míg a v_m pozitív

valós számok az egyes faktorok varianciáját képviselik, megválasztásukról a későbbiekben szólnunk.

Elméletileg az idősort gyengén stacionáriusnak képzeljük, ami azt jelenti, hogy y_t és y_{t+h} kovarianciája csak $|h|$ -től függ. Ez a tulajdonság a gyakorlatban általában nem teljesül, de az idősoranalízis standard módszereivel a folyamat ilyenre transzformálható (l. [8, 13]). Itt ezzel nem foglalkozunk, feltételezzük, hogy adatsorunk már átment ezeken a transzformációkon.

6.3. A paraméterek becslése

Bevezetünk néhány jelölést:

$$\bar{y}_i = \frac{1}{t_2 - t_1 + 1} \sum_{t=t_1}^{t_2} y_i(t)$$

jelöli az i -edik komponens mintaátlagát, míg

$$\text{Cov}(y_i, y_j) = \frac{1}{t_2 - t_1 + 1} \sum_{t=t_1}^{t_2} (y_i(t) - \bar{y}_i) \cdot (y_j(t) - \bar{y}_j)$$

az empirikus kovarianciát,

$$\text{Cov}^*(y_i, y_j) = \frac{1}{t_2 - t_1} \sum_{t=t_1}^{t_2} (y_i(t) - \bar{y}_i) \cdot (y_j(t) - \bar{y}_j)$$

pedig a korrigált empirikus kovarianciát az i és j változó közt. Az

$$Y_{ij} = \text{Cov}(y_i, y_j), \quad i, j = 1, \dots, n$$

jelöléssel legyen $\mathbf{Y} = (Y_{ij})$ a szimmetrikus, pozitív szemidefinit, $n \times n$ -es empirikus kovarianciamátrix (néha a korrigáltat használjuk).

Könnyű látni, hogy a c_{m0} és d_{0i} paraméterek a többi paraméterrel kifejezhetők a következőképpen:

$$c_{m0} = \frac{1}{t_2 - t_1 - \ell + 1} \sum_{t=t_1+\ell}^{t_2} (f_m(t) - \sum_{j=1}^{\ell} c_{mj} f_m(t-j)), \quad m = 1, \dots, k$$

és

$$d_{0i} = \bar{y}_i - \sum_{m=1}^k d_{mi} \bar{f}_m, \quad i = 1, \dots, n.$$

Ezért a ténylegesen becsülendő paraméterek az $n \times k$ -as \mathbf{B} , a $k \times n$ -es \mathbf{D} és a $k \times \ell$ -es \mathbf{C} mátrix elemei. Jelölje továbbá $\mathbf{b}_m \in \mathbb{R}^n$ a \mathbf{B} mátrix m -edik oszlopát.

Definiáljuk az ún. késleltetett idősorokat a

$$z_i^m(t) = y_i(t) - \sum_{j=1}^{\ell} c_{mj} y_i(t-j), \quad t = t_1 + \ell, \dots, t_2; \quad i = 1, \dots, n; \quad m = 1, \dots, k \quad (6.6)$$

formulával, a késleltetett empirikus kovarianciamátrix elemeit pedig a

$$Z_{ij}^m := \text{Cov}(z_i^m, z_j^m) = \frac{1}{t_2 - t_1 - \ell + 1} \sum_{t=t_1+\ell}^{t_2} (z_i^m(t) - \bar{z}_i^m) \cdot (z_j^m(t) - \bar{z}_j^m) \quad (6.7)$$

formulával ($m = 1, \dots, k$), ahol

$$\bar{z}_i^m = \frac{1}{t_2 - t_1 - \ell + 1} \sum_{t=t_1+\ell}^{t_2} z_i^m(t), \quad i = 1, \dots, n.$$

Végezetül jelölje $\mathbf{Z}^m = (Z_{ij}^m)$ az m -el késleltetett idősor szimmetrikus, pozitív szemidefinit, $n \times n$ -es empirikus kovarianciamátrixát ($m = 1, \dots, k$).

Ezután a (6.4) célfüggvényt ezen mennyiségekkel írjuk fel, a következő átalakítások segítségével:

$$f_m(t) - \hat{f}_m(t) = \sum_{j=1}^n b_{jm} z_j^m(t) - c_{m0}$$

és

$$\text{Var}(f_m - \hat{f}_m)_\ell = \mathbf{b}_m^T \mathbf{Z}^m \mathbf{b}_m. \quad (6.8)$$

Az (6.1) modellegyenlet értelmében

$$\text{Var}(f_m) = \mathbf{b}_m^T \mathbf{Y} \mathbf{b}_m, \quad m = 1, \dots, k$$

és

$$\text{Cov}(y_i, f_m) = \sum_{j=1}^n b_{jm} Y_{ij}, \quad i = 1, \dots, n; \quad m = 1, \dots, k.$$

Továbbá a faktorok ortogonalitásának és az (6.3) modellegyenletnek köszönhetően

$$\begin{aligned} \text{Var}(y_i - \hat{y}_i) &= Y_{ii} - 2 \sum_{m=1}^k d_{mi} \text{Cov}(y_i, f_m) + \sum_{m=1}^k d_{mi}^2 v_m \\ &= Y_{ii} - 2 \sum_{m=1}^k d_{mi} \sum_{j=1}^n b_{jm} Y_{ij} + \sum_{m=1}^k d_{mi}^2 v_m \end{aligned}$$

teljesül.

Ezek felhasználásával az (6.4)-beli, minimalizálandó célfüggvény a

$$G(\mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}) = w_0 \sum_{m=1}^k \mathbf{b}_m^T \mathbf{Z}^m \mathbf{b}_m + \sum_{i=1}^n w_i Y_{ii} - 2 \sum_{i=1}^n w_i \sum_{m=1}^k d_{mi} \sum_{j=1}^n b_{jm} Y_{ij} \\ + \sum_{i=1}^n w_i \sum_{m=1}^k d_{mi}^2 v_m$$

alakot ölti, ahol a minimumot a

$$\mathbf{b}_m^T \mathbf{Y} \mathbf{b}_h = \delta_{mh} \cdot v_m, \quad m, h = 1, \dots, k \quad (6.9)$$

kényszerfeltételek mellett keressük.

A minimumot kereső algoritmus a következő kétciklusú iterációt használja. Válasszunk egy kezdeti $\mathbf{B}^{(0)}$ mátrixot, mely kielégíti a (6.9) feltételeket. Ezekkel ismételjük az alábbi külső ciklust konvergenciáig. A t -edik külső ciklus lépései a következők.

1. lépés: A $\mathbf{B}^{(t)}$ -beli együtthatókkal kiszámoljuk f_m -eket az (6.1) modellegyenlet alapján. Ezután a lineáris modell (Gauss normálegyenletek, l. [1]) standard legkisebb négyzetes módszerével becsüljük az (6.2) autoregressziós modell paramétereit. Így megkapjuk az együtthatók $\mathbf{C}^{(t)}$ mátrixát.
2. lépés: $\mathbf{C}^{(t)}$ alapján kiszámoljuk a \mathbf{Z}^m mátrixokat a (6.6) és (6.7) formulákkal (\mathbf{Z}^m kiszámolásához a $\mathbf{C}^{(t)}$ mátrixnak csak az m -edik sorát használjuk fel), $m = 1, \dots, k$. Ez a \mathbf{Z}^m szintén függ t -től, azonban nem szeretnénk túlkomplicálni a jelöléseket, így nem használjuk t -t, értelemszerűen az aktuális \mathbf{Z}^m mátrixra gondolunk. Behelyettesítve ezt a segédváltozót $G(\mathbf{B}^{(t)}, \mathbf{C}^{(t)}, \mathbf{D})$ kifejezésébe, minimalizáljuk $G(\mathbf{B}^{(t)}, \mathbf{C}^{(t)}, \mathbf{D})$ -t \mathbf{D} szerint, miközben a \mathbf{B} és \mathbf{C} mátrixok t -edik rögzített iteráltjait használjuk. A minimumot adó \mathbf{D} -t $\mathbf{D}^{(t)}$ -vel jelöljük.
3. lépés: Ezesetben \mathbf{C} -t és \mathbf{D} -t rögzítve minimalizáljuk $G(\mathbf{B}, \mathbf{C}^{(t)}, \mathbf{D}^{(t)})$ -t \mathbf{B} -ben. Ehhez a később tárgyalandó belső ciklusra van szükség. A minimumot adó \mathbf{B} -t $\mathbf{B}^{(t+1)}$ -el jelöljük (ez lesz a \mathbf{B} mátrix következő iteráltja).

Ezzel az új \mathbf{B} mátrixszal visszatérünk a külső ciklus 1. lépéséhez ($t := t + 1$), és konvergenciáig folytatjuk eljárásunkat. Mivel a nem-negatív célfüggvény értéke minden egyes lépésben csökken, értéke egy idő után egy pozitív érték körül stabilizálódik, ami persze függhet a kezdőértéktől. Így az iterációnak csak egy lokális minimumhoz való konvergenciája garantálható.

A belső ciklust a következő fejezetben tárgyaljuk, viszont az alábbiakban részletezzük a 2. lépést és a 3. lépés előkészítését.

2. lépés: \mathbf{C} -t rögzítve, a célfüggvény \mathbf{B} -től és \mathbf{D} -től függő, ezekben minimalizálandó része a következő:

$$g(\mathbf{B}, \mathbf{D}) = w_0 \sum_{m=1}^k \mathbf{b}_m^T \mathbf{Z}^m \mathbf{b}_m + \sum_{i=1}^n w_i \sum_{m=1}^k d_{mi}^2 v_m - 2 \sum_{i=1}^n w_i \sum_{m=1}^k d_{mi} \sum_{j=1}^n b_{jm} Y_{ij},$$

melyet először \mathbf{D} -ben optimalizálunk. Ehhez meg kell oldanunk a

$$\frac{\partial g(\mathbf{B}, \mathbf{D})}{\partial d_{mi}} = 2w_i v_m d_{mi} - 2w_i \sum_{j=1}^n b_{jm} Y_{ij} = 0$$

egyenleteket \mathbf{D} minden egyes elemére. Könnyen látható, hogy az optimális \mathbf{D}^{opt} alábbi elemei adják $g(\mathbf{B}, \mathbf{D})$ lokális minimumát rögzített \mathbf{B} mellett:

$$d_{mi}^{opt} = \frac{1}{v_m} \sum_{j=1}^n b_{jm} Y_{ij}, \quad m = 1, \dots, k; i = 1, \dots, n.$$

3. lépés: Beírva az így kapott \mathbf{D}^{opt} -ot $g(\mathbf{B}, \mathbf{D})$ kifejezésébe, az a következő alakot ölti:

$$g(\mathbf{B}, \mathbf{D}^{opt}) = w_0 \sum_{m=1}^k \mathbf{b}_m^T \mathbf{Z}^m \mathbf{b}_m - \sum_{m=1}^k \frac{1}{v_m} \sum_{i=1}^n w_i \left(\sum_{j=1}^n b_{jm} Y_{ij} \right)^2.$$

Innen az $n \times n$ -es szimmetrikus $\mathbf{V} = (V_{jh})$ mátrix $V_{jh} = \sum_{i=1}^n w_i Y_{ij} Y_{ih}$ elemenkénti definíciójával és az $n \times n$ -es szimmetrikus

$$\mathbf{S}_m = w_0 \mathbf{Z}^m - \frac{1}{v_m} \mathbf{V}, \quad m = 1, \dots, k,$$

mátrix bevezetésével $g(\mathbf{B}, \mathbf{D}^{opt})$ a

$$g(\mathbf{B}, \mathbf{D}^{opt}) = \sum_{m=1}^k \mathbf{b}_m^T \mathbf{S}_m \mathbf{b}_m \quad (6.10)$$

alakba írható, melyet a \mathbf{b}_m -ekre tett kényszerfeltételek mellett minimalizálunk.

Ahhoz, hogy a 6.4. paragrafusban bevezetendő algoritmust alkalmazzuk, a $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m$ vektorokat egy ortonormált rendszerbe kell transzformálnunk. A kényszerfeltételek figyelembe vételével az

$$\mathbf{x}_m := \frac{1}{\sqrt{v_m}} \mathbf{Y}^{1/2} \mathbf{b}_m, \quad \mathbf{A}_m := v_m \mathbf{Y}^{-1/2} \mathbf{S}_m \mathbf{Y}^{-1/2}, \quad m = 1, \dots, k \quad (6.11)$$

transzformáció az $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ ortonormált rendszert eredményezi, továbbá

$$\mathbf{b}_m^T \mathbf{S}_m \mathbf{b}_m = \mathbf{x}_m^T \mathbf{A}_m \mathbf{x}_m, \quad m = 1, \dots, k$$

miatt

$$g(\mathbf{B}, \mathbf{D}^{opt}) = \sum_{m=1}^k \mathbf{x}_m^T \mathbf{A}_m \mathbf{x}_m \quad (6.12)$$

adódik.

A következő rész algoritmus (belső ciklus) a fenti (6.12)-beli inhomogén kvadrátikus alakok összegét minimalizálja. Legyen $\mathbf{x}_1^{opt}, \dots, \mathbf{x}_k^{opt}$ a minimumot adó ortonormált rendszer. Végezetül a (6.11)-beli első transzformáció invertálásával, a

$$\mathbf{b}_m^{opt} = \sqrt{v_m} \mathbf{Y}^{-1/2} \mathbf{x}_m^{opt}, \quad m = 1, \dots, k$$

vektorok adják annak az optimális \mathbf{B}^{opt} mátrixnak az oszlopait, mely a $g(\mathbf{B}, \mathbf{D}^{opt})$ kifejezést minimalizálja.

6.4. Szimmetrikus mátrixok kompromisszuma

Adottak az $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k$ $n \times n$ -es szimmetrikus, egyelőre pozitív definit mátrixok ($k \leq n$). Keressük azt az $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ ortonormált rendszert, melyre az inhomogén kvadrátikus alakok

$$\sum_{i=1}^k \mathbf{x}_i^T \mathbf{A}_i \mathbf{x}_i$$

összege maximális.

Az elméleti megoldást Lagrange multiplikátor módszerrel kapjuk: az optimumot adó \mathbf{x}_i -k kielégítik a

$$A(\mathbf{X}) = \mathbf{X}\mathbf{S} \quad (6.13)$$

egyenletrendszert valamely $k \times k$ -as szimmetrikus \mathbf{S} mátrixszal (melynek elemei éppen a multiplikátorok), ahol az $n \times k$ -as \mathbf{X} és $A(\mathbf{X})$ mátrixok a következőképpen vannak definiálva oszlopaikkal:

$$\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k), \quad A(\mathbf{X}) = (\mathbf{A}_1 \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{A}_k \mathbf{x}_k).$$

Az $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k$ vektorok ortonormáltsága miatt az

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{I}_k \quad (6.14)$$

(nem-lineáris) egyenletrendszernek szintén teljesülnie kell. Mivel \mathbf{X} és a szimmetrikus \mathbf{S} összesen $nk + k(k+1)/2$ szabad paramétert tartalmaznak, (6.13) és (6.14) pedig ugyanennyi egyenletet, a problémára megoldás várható.

Ha az (6.13) mátrixegyenletet egy homogén lineáris egyenletrendszerré transzformáljuk, akkor láthatjuk, hogy nem-triviális megoldás akkor létezik, ha az együtthatómátrix determinánsa nulla:

$$|\mathbf{A} - \mathbf{I}_n \otimes \mathbf{S}| = 0, \quad (6.15)$$

ahol az $nk \times nk$ -es \mathbf{A} mátrix a $\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 \oplus \cdots \oplus \mathbf{A}_k$ ún. Kronecker-összeggel fejezhető ki (azaz az $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k$ mátrixok alkotják az \mathbf{A} mátrix diagonális blokkjait), \otimes pedig a Kronecker-szorzatot jelöli.

A (6.15) egyenlet egy általánosított karakterisztikus egyenlet, mivel egy $k(k+1)/2$ -fokú polinomja az \mathbf{S} szimmetrikus, ún. kompromisszum-mátrix elemeinek. Az elméleti megoldás nem ismeretes, numerikus megoldással próbálkozhatunk. Ehelyett, a [3] cikkben egy algoritmust vezettünk be, melynek konvergenciáját a megoldáshoz bizonyítottuk. Most ezt ismertetjük.

Egy $\mathbf{X}^{(0)}$ szubortogonális mátrixból (oszlopai ortonormáltak) kiindulva az iteráció m -edik lépése az $(m-1)$ -edik alapján a következő $(m=1, 2, \dots)$. Vegyük az $A(\mathbf{X}^{(m-1)})$ mátrix poláris felbontását egy $\mathbf{X}^{(m)}$ $n \times k$ -as szuborthogonális és egy $\mathbf{S}^{(m)}$ $k \times k$ -as szimmetrikus mátrix szorzatára. Legyen az első tényező $\mathbf{X}^{(m)}$, és folytatjuk konvergenciáig.

Magát a poláris felbontást (l. [1]) mátrixok szinguláris érték felbontásával (SVD) kapjuk. A [3] cikkben bizonyítottuk az algoritmus konvergenciáját. Megjegyezzük továbbá, hogy a $\text{tr}\mathbf{S}^{(m)}$ sorozat konvergál a célfüggvény maximumához.

Az alábbi iteráció könnyen adaptálható pozitív/negatív szemidefinit vagy indefinit mátrixokra, és minimumkeresésre maximum helyett.

Keressük meg például

$$\sum_{i=1}^k \mathbf{x}_i^T \mathbf{A}_i \mathbf{x}_i$$

minimumát a (6.14) kényszerfeltételek mellett, ahol $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_n$ tetszőleges $n \times n$ -es szimmetrikus mátrixok. Legyen λ_i^{\max} az \mathbf{A}_i mátrix legnagyobb sajátértéke $(i=1, \dots, k)$ és legyen

$$\lambda := \max_{i \in \{1, \dots, k\}} \lambda_i^{\max} + \varepsilon,$$

ahol ε egy tetszőleges, 'kis' konstans. Ekkor az

$$\tilde{\mathbf{A}}_i := \lambda \mathbf{I}_n - \mathbf{A}_i, \quad i = 1, \dots, k$$

mátrixok pozitív definiték és

$$\min \sum_{i=1}^k \mathbf{x}_i^T \mathbf{A}_i \mathbf{x}_i = -\max \sum_{i=1}^k \mathbf{x}_i^T (-\mathbf{A}_i) \mathbf{x}_i = \lambda k - \max \sum_{i=1}^k \mathbf{x}_i^T \tilde{\mathbf{A}}_i \mathbf{x}_i;$$

továbbá az elsőként szereplő, \mathbf{A}_i -ktől függő összeg minimuma ugyanazokon az \mathbf{x}_i -ken vétetik fel, mint az utolsó, $\tilde{\mathbf{A}}_i$ -októl függő összeg maximuma.

6.5. Alkalmazás

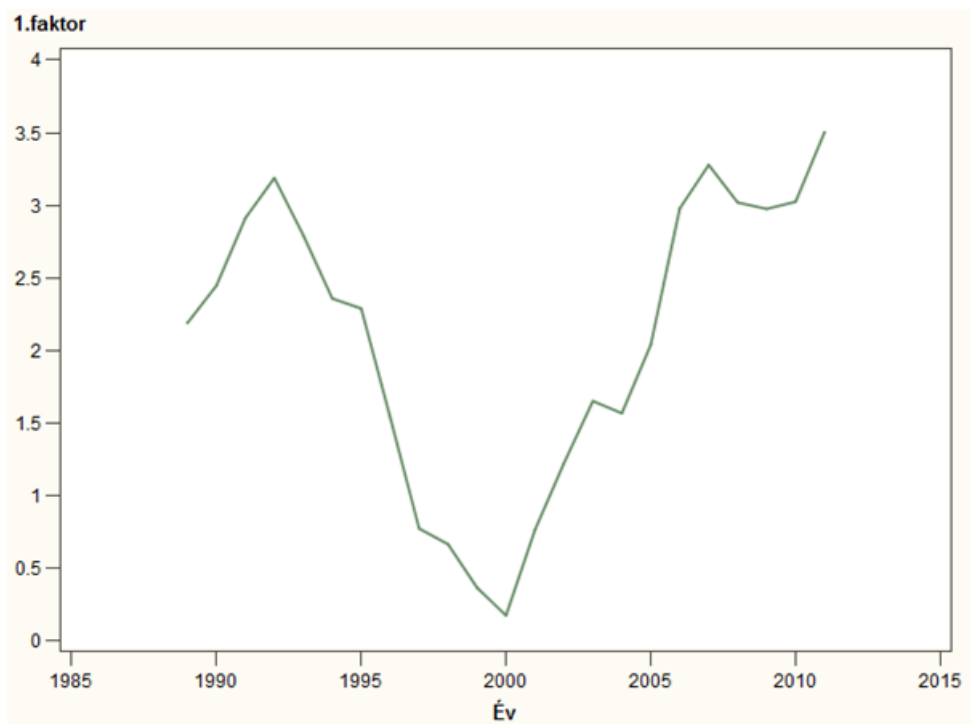
A KSH honlapjáról kerestünk a gazdaságot reprezentatívan jellemző, egymással összefüggő, aggregált változókat. A 10 változóra vonatkozó éves idősorok az 1989–2011 közti időszakokra vonatkoznak.

A változók nevei és rövidítései a következők:

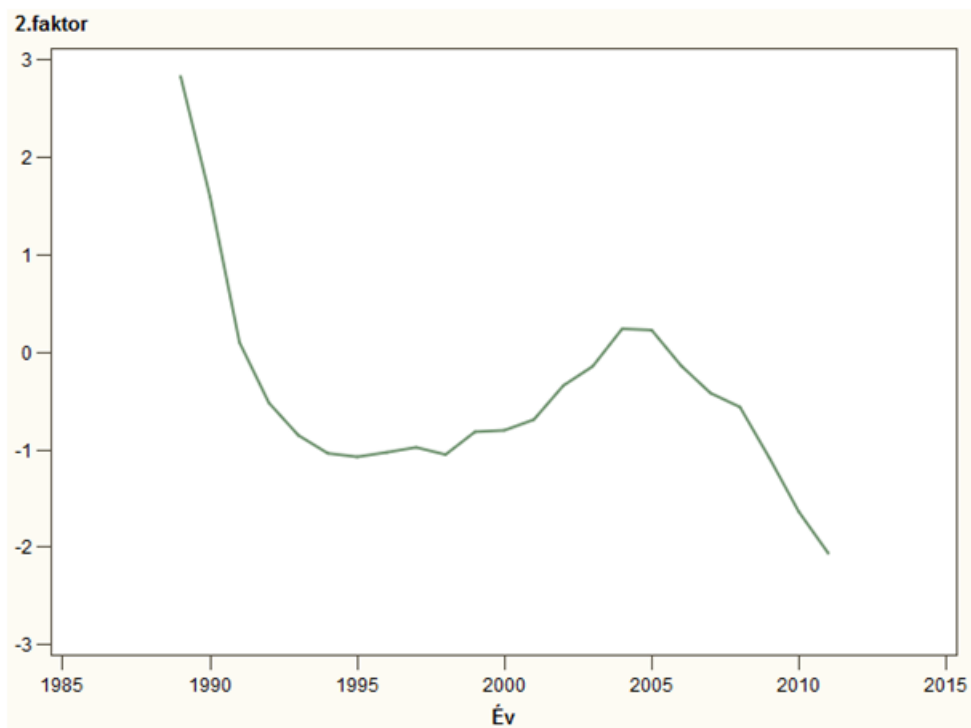
1. Épített lakások száma – ÉLSZ
2. Bruttó hazai termék – GDP
3. GDP végső fogyasztás összesen – GDPVF
4. GDP bruttó felhalmozás összesen – GDPBF
5. Beruházás folyó áron – BERUH
6. Fogyasztóiár-index – FÁI
7. Fogyasztóiár-indexből élelmiszer – FÁIÉ
8. Kiskereskedelmi forgalom indexe – KFI
9. Áruszállítás indexe tonna alapján – ÁIT
10. Személygépkocsik száma – SZS

3 faktort választottunk le 4-es késleltetési értékkel (melyek a kormányzási periódusoknak felelnek meg). Miután a változók különböző egységekben voltak megadva, standardizáltuk azokat. A változók súlyai a szórások reciprokai, a faktorok súlyai egyenlőek voltak.

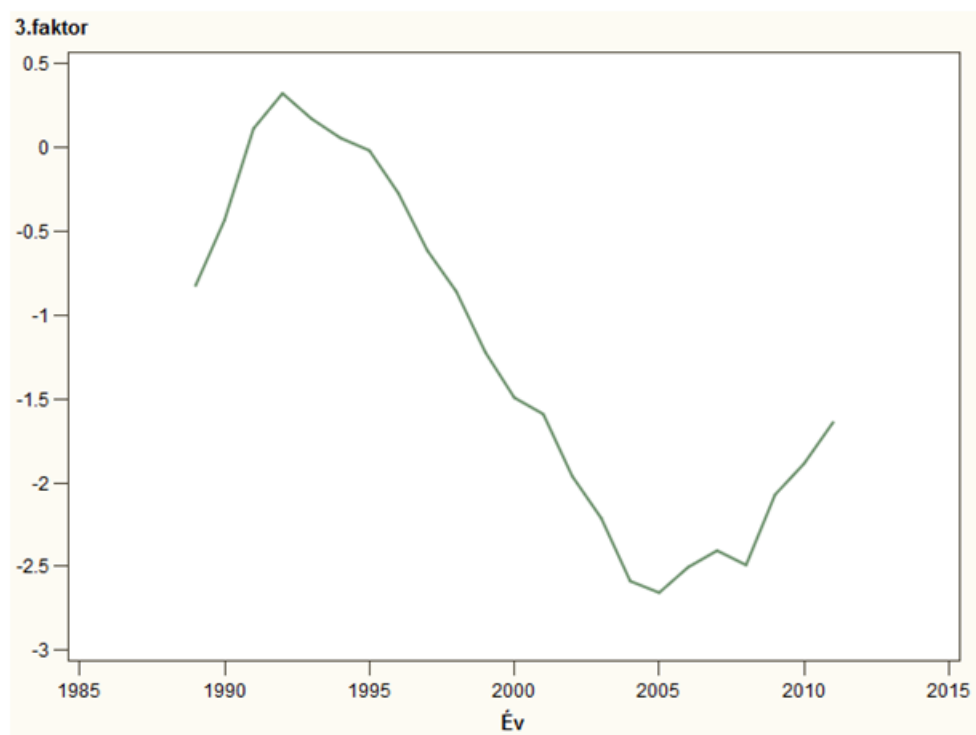
Az 1., 2. és 3. ábra a három faktor időbeli lefutását ábrázolja.



1. ábra



2. ábra



3. ábra

Az 1. Táblázat a változók súlyát mutatja az egyes faktorokban.

	1.faktor	2.faktor	3.faktor
ÉLSZ	-1.056	1.775	-0.609
GDP	-1.454	1.940	-0.798
GDPVF	-8.234	1.641	-2.457
GDPBF	-1.075	-0.541	-0.253
BERUH	-5.110	1.255	-2.350
FÁI	-10.509	1.773	-4.556
FÁIÉ	11.263	-4.451	4.623
KFI	11.267	-0.867	2.328
ÁIT	-0.990	0.611	-0.594
SZS	9.730	-3.186	2.205

1. Táblázat

A 2. Táblázat az egyes változók előrejelzését mutatja a faktorok lineáris kombinációjaként. Ahol nagy a konstans, ott a változó kommunalitása viszonylag kicsi.

	1.faktor	2.faktor	3.faktor	Constant term
ÉLSZ	0.019	0.212	-0.071	0.411
GDP	0.110	0.002	-0.325	-0.167
GDPVF	0.138	0.024	-0.305	-0.188
DDPBF	-0.068	-0.025	-0.273	0.383
BERUH	0.051	-0.106	-0.343	-0.079
FÁI	0.052	-0.142	-0.276	-0.028
FÁIÉ	0.065	-0.144	-0.257	-0.064
KFI	0.130	0.103	-0.250	-0.058
ÁIT	0.053	0.058	-0.284	0.099
SZS	0.093	-0.115	-0.264	-0.005

2. Táblázat

A 3. Táblázatban a faktorok dinamikus egyenletének együtthatói láthatók. Megfigyelhető, hogy mindhárom faktorra az egy évvel előbbi értékeik vannak a legnagyobb befolyással, majd a két évvel későbbiek ellenkező előjellel (ami utalhat a kormányzati periódusokban az új intézkedések bevezetésének pozitív, majd negatív hatására).

	1.faktor	2.faktor	3.faktor
0.	0.063	-0.034	-0.062
1.	1.644	1.759	1.563
2.	-1.056	-0.848	-0.520
3.	0.721	0.067	0.046
4.	-0.338	-0.002	-0.115

3. Táblázat

A példa webes felületen is megtekinthető.

<http://calculus.hu/autograph/dinfak.html>

Irodalomjegyzék

- [1] Bánkövi, G., Veliczky, J., Ziermann, M., 1982. Multivariate time series analysis and forecast. In: Grossmann, V., Pflug, G., Wertz, W. (Eds.), *Probability and Statistical Inference*. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, pp. 29–34.
- [2] Bánkövi, G., Veliczky, J., Ziermann, M., 1983. Estimating and forecasting dynamic economic relations on the basis of multiple time series. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 63, 398–399.
- [3] Bolla, M., Michaletzky, G., Tusnády, G., Ziermann, M., 1998. Extrema of sums of heterogeneous quadratic forms. *Linear Algebra and its Applications* 269, 331–365.
- [4] Bolla, M., Krámli, A., *Statisztikai következtetések elmélete*. Typotex, Budapest, 2005 és 2012.
- [5] Bolla, M., Kurdyukova, A., 2010. Dynamic factors of macroeconomic data. *Annals of the University of Craiova, Mathematics and Computer Science Series* 37 (4), 18–28.
- [6] Box, G. E. P., Tiao, G. C., 1977. A canonical analysis of multiple time series. *Biometrika* 64 (2), 355–365.
- [7] Deistler, M., Hamann, E., 2005. Identification of factor models for forecasting returns. *Journal of Financial Econometrics* 3 (2), 256–281.
- [8] Deistler, M., Zinner, C., 2007. Modelling high-dimensional time series by generalized linear dynamic factor models: an introductory survey. *Communications in Information and Systems* 7 (2), 153–166.
- [9] Denton, F. T., 1978. Single-equation estimators and aggregation restrictions when equations have the same set of regressors. *Journal of Econometrics* 8, 173–179.
- [10] Geweke, J. F., 1977. The dynamic factor analysis of economic time series. In: Aigner, D., Goldberger, A. (Eds.), *Latent Variables in Socio-economic Models*. North-Holland, Amsterdam, pp. 365–382.

- [11] Geweke, J. F., Singleton, K. J., 1981. Maximum likelihood „confirmatory” factor analysis of economic time series. *International Economic Review* 22, 37–54.
- [12] Stock, J. H., Watson, M. W., 2002. Forecasting using principal components from a large number of predictors. *Journal of the American Statistical Association* 97 (460), 1167–1179.
- [13] Tusnády, G., Ziermann, M. szerk., *Idősorok analízise*. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1986.

7. fejezet

A varianciaanalízis általános modelljei

*„S a rossz úton, mert minden ellovan,
Felüti néha fejét a lovam
És megkérdi, míg szép feje kigyúl:
Hát mi lesz ebből, tekintetes úr?”
(Ady Endre: A ló kérdez)*

7.1. Többváltozós varianciaanalízis (MANOVA)

A varianciaanalízis (ANOVA, l. [1]) – mely egy normális eloszlású változó különböző csoportokban való megfigyelésein alapul – egyik lehetséges általánosítása a többváltozós varianciaanalízis (MANOVA), melyben a különböző szinteken megfigyelt változó többdimenziós folytonos (általában többdimenziós normális) eloszlást követ.

Az egyszempontos modellben p -változós megfigyeléseink vannak k különböző csoportban. Többdimenziós normális esetben az egyes megfigyelések kovarianciamátrixa ugyanaz, csak várható érték vektoraik különbözhetnek, éppen azt szeretnénk megvizsgálni, hogy szignifikáns-e köztük a különbség. Legyen

$$\mathbf{Y}_{ij} \sim \mathcal{N}_p(\mathbf{m} + \mathbf{a}_i, \mathbf{C}) \quad (j = 1, \dots, n_i; i = 1, \dots, k),$$

$\sum_{i=1}^k n_i = n$, ahol feltehető, hogy $\sum_{i=1}^k \mathbf{a}_i = \mathbf{0}$. A

$$H_0 : \mathbf{a}_1 = \dots = \mathbf{a}_k = \mathbf{0}$$

hipotézis vizsgálatához szükségünk van a $p \times p$ -es empirikus kovarianciamátrix n -szeresének (\mathbf{T}) a felbontására csoportok közti (\mathbf{B}) és csoportokon belüli (\mathbf{W}) szóródást kifejező tagokra:

$$\mathbf{T} = \mathbf{B} + \mathbf{W},$$

ahol

$$\begin{aligned}
\mathbf{T} &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n_i} (\mathbf{Y}_{ij} - \bar{\mathbf{Y}}_{..})(\mathbf{Y}_{ij} - \bar{\mathbf{Y}}_{..})^T \\
\mathbf{B} &= \sum_{i=1}^k n_i (\bar{\mathbf{Y}}_{i.} - \bar{\mathbf{Y}}_{..})(\bar{\mathbf{Y}}_{i.} - \bar{\mathbf{Y}}_{..})^T \\
\mathbf{W} &= \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n_i} (\mathbf{Y}_{ij} - \bar{\mathbf{Y}}_{i.})(\mathbf{Y}_{ij} - \bar{\mathbf{Y}}_{i.})^T.
\end{aligned} \tag{7.1}$$

Itt $\bar{\mathbf{Y}}_{..} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n_i} \mathbf{Y}_{ij}$ a mintaátlag vektor, míg $\bar{\mathbf{Y}}_{i.} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \mathbf{Y}_{ij}$ az i -edik csoport átlagvektora ($i = 1, \dots, k$).

Ezek segítségével hasonló vizsgálatok végezhetők, mint az egyváltozós esetben, l. [3]. Megjegyezzük, hogy \mathbf{W} hasonló a 5. Fejezetben bevezetett k -variancia nevű mennyiséghez.

7.2. Nemparaméteres varianciaanalízis

Itt részletesebben a másik általánosítással foglalkozunk, melyben egy vegyes típusú változó megfigyelt értékei alapján szeretnénk különbséget tenni csoportok között, először egy szempont szerint.

Megfigyeléseink legyenek egy diszkrét változó értékei. Az objektumokat valamely ismerv alapján diszjunkt csoportokba soroljuk. Ezek után az adatok struktúrája a következő:

$$\begin{aligned}
&1. \text{ csoport: } X_{11} \dots X_{1,n_1} \\
&2. \text{ csoport: } X_{21} \dots X_{2,n_2} \\
&\vdots \\
&d. \text{ csoport } X_{d1} \dots X_{d,n_d}
\end{aligned}$$

Legyen $n := \sum_{i=1}^d n_i$. Rendeljünk rangokat minden egyes mintaelemhez az egyesített mintában. A legkisebb kapja az 1-et, a második legkisebb a 2-et, és így tovább, a legnagyobb kapja n -et. Jelölje R_{ij} az X_{ij} -hez rendelt rangot. Legyen R_i az i -edik csoport rangösszege. Ha két vagy több mintaelem azonos, akkor ezekhez átlagolt rangot rendelünk. Néhány általános feltétel:

- A mintaelemek véletlen minták a saját sokaságukból.
- A csoportok között, illetve a csoportokon belül függetlenek a mintaelemek.
- Az adatok legalább sorrendi skálán értelmezhetők.

Brunner és Puri [2]-beli, 2001-ben publikált nem-paraméteres módszerét ismertetjük, melynek modellje a következő:

$$X_{ij} \sim F_i(x), \quad j = 1, \dots, n_i; \quad i = 1, \dots, d,$$

ahol $F_i(x) = \frac{1}{2} [F_i^+(x) + F_i^-(x)]$ jelöli az eloszlásfüggvény normalizált változatát. ($F_i^+(x) = P(X_i \leq x)$ a jobbról folytonos, $F_i^-(x) = P(X_i < x)$ pedig a balról folytonos eloszlásfüggvényt jelöli.)

A nullhipotézis pedig:

$$H_0 : F_1 = F_2 = \dots = F_d,$$

vagy másképpen

$$H_0^F : \mathbf{C}\mathbf{F} = \mathbf{0},$$

ahol \mathbf{C} a $d \times d$ -es centráló mátrix: $\mathbf{C} = \mathbf{I}_d - \frac{1}{d}\mathbf{1}\mathbf{1}^T$, ahol $\mathbf{1}$ jelöli azt a d -dimenziós vektort, amelynek az összes koordinátája 1. $\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_d)^T$.

Általában diszkrét megfigyelések alapján szeretnénk dönteni arról, hogy a kialakított csoportok megfigyelései azonos eloszlásúak-e. Ilyen kérdések a gyakorlatban sokszor felvetődnek. Például ugyanazon tantárgyból tartott több gyakorlat gyakorlatvezetőinek tevékenységét szeretnénk összehasonlítani a hallgatók (0–5 pontos skálán adott) értékelése alapján (minden gyakorlatvezetőnek mások a hallgatói). Másik példa: különböző korosztályokban vagy iskolázottsági csoportokban szeretnénk összehasonlítani internetezési szokásokat diszkrét megfigyelések alapján (pl. internetezéssel töltött órák száma, letöltött oldalak kódjai, stb.). Harmadik példa: néhány szorongásgátló gyógyszer hatását szeretnénk összehasonlítani (a gyógyszereket páciensek különböző csoportjain próbálták ki) diszkrét változók (pl. a szorongás fokozata) alapján.

Definiáljuk az i -edik relatív kezelési hatást:

$$p_i = \int H(x) dF_i(x), \quad i = 1, \dots, d,$$

ahol $H(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^d n_i F_i(x)$ az eloszlásfüggvények súlyozott átlaga. Például ha $H(x) \equiv x$, akkor $p_i = \mu_i = \int x dF_i(x)$ a várható érték. Ebben az értelemben $p_i = \int H dF_i$ tekinthető egy általánosított várható értéknek.

Mivel az X_{ij} ($j = 1, \dots, n_i$) valószínűségi változók függetlenek és azonos eloszlásúak, p_i felírható a $P(X_{j1} < X_{i1})$ valószínűségek súlyozott átlagaként, i rögzített, az átlagot $j = 1, \dots, d$ -ig vesszük. Ugyanis $F_j(x) = P(X_{j1} < x) + \frac{1}{2}P(X_{j1} = x)$ és $H(x) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^d n_j [P(X_{j1} < x) + \frac{1}{2}P(X_{j1} = x)]$, a Bayes-tétel miatt pedig

$$p_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^d n_j \left[P(X_{j1} < X_{i1}) + \frac{1}{2}P(X_{j1} = X_{i1}) \right].$$

Amennyiben az eloszlásfüggvények folytonosak, úgy $P(X_{j1} = X_{i1}) = 0$ és $p_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^d n_j P(X_{j1} \leq X_{i1})$.

A p_i relatív kezelési hatást úgy becsülhetjük meg, hogy az eloszlásfüggvényeket az empirikus eloszlásfüggvényekkel helyettesítjük:

$$\hat{F}_i(x) = \frac{1}{2} [\hat{F}_i^+(x) + \hat{F}_i^-(x)] = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} c(x - X_{ij}),$$

ahol $c(u) = \frac{1}{2} [c^+(u) + c^-(u)]$ jelöli a számláló függvényt:

$$c(u) = \begin{cases} 1, & \text{ha } u > 0 \\ 1/2, & \text{ha } u = 0 \\ 0, & \text{ha } u < 0. \end{cases}$$

Ekkor

$$\hat{H}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^d n_i \hat{F}_i(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^{n_i} c(x - X_{ij}).$$

Ha kiszámítjuk a mintaelemek rangszámait (jelölje R_{ij} az X_{ij} mintaelemhez tartozó rangot az egyesített mintában), akkor azt vehetjük észre, hogy

$$R_{ij} = \frac{1}{2} + \sum_{r=1}^d \sum_{s=1}^{n_r} c(X_{ij} - X_{rs}) = \frac{1}{2} + n \hat{H}(X_{ij})$$

azaz

$$\hat{p}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \hat{H}(X_{ij}) = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{n} \left(R_{ij} - \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{n} \left(\bar{R}_{i\cdot} - \frac{1}{2} \right),$$

ahol $\bar{R}_{i\cdot} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} R_{ij}$.

Tehát sikerült előállítani a $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_d)^T$ vektort:

$$\hat{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \vdots \\ \hat{p}_d \end{pmatrix} = \frac{1}{n} \begin{pmatrix} \bar{R}_{1\cdot} - \frac{1}{2} \\ \vdots \\ \bar{R}_{d\cdot} - \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

A [2] cikkben tárgyalják a következő tételeket.

Regularitási feltételek:

1. $n = \sum_{i=1}^d n_i \rightarrow \infty$,
2. $\frac{n}{n_i} \leq n_0 < \infty$, $i = 1, \dots, d$, valamely n_0 konstanssal,
3. $\sigma_i^2 = \text{Var}[H(X_{i1})] > 0$, $i = 1, \dots, d$.

7.1. Tétel (konzisztencia) Legyenek $X_{ij} \sim F_i(x)$, $i = 1, \dots, d$, $j = 1, \dots, n_i$ független valószínűségi változók, és legyen p_i ill. \hat{p}_i az előbb definiált. Az első és második regularitási feltételek teljesülése esetén $\mathbb{E}(\hat{p}_i - p_i)^2 \rightarrow 0$, $i = 1, \dots, d$, ha $n \rightarrow \infty$.

Azaz \hat{p}_i a p_i paraméternek négyzetes középben, és így gyengén is konzisztens becslése. Definiáljuk a következő mátrixot:

$$\mathbf{V}_n = n \cdot \text{diag} \left\{ \frac{\sigma_1^2}{n_1}, \frac{\sigma_2^2}{n_2}, \dots, \frac{\sigma_d^2}{n_d} \right\}.$$

7.2. Tétel (varianciák becslése) Legyenek $X_{ij} \sim F_i(x)$, $i = 1, \dots, d$, $j = 1, \dots, n_i$ független valószínűségi változók, legyen σ_i^2 a harmadik regularitási feltételben definiált variancia, a három regularitási feltétel teljesülése esetén $\mathbb{E}(\hat{\sigma}_i^2/\sigma_i^2 - 1)^2 \rightarrow 0$, ha $n \rightarrow \infty$, ahol

$$\hat{\sigma}_i^2 = \frac{1}{n^2 (n_i - 1)} \sum_{j=1}^{n_i} (R_{ij} - \bar{R}_i)^2.$$

Azaz $\hat{\sigma}_i^2$ és σ_i^2 aszimptotikusan ekvivalensek.

7.3. Tétel (aszimptotikus normalitás) Legyenek $X_{ij} \sim F_i(x)$, $i = 1, \dots, d$; $j = 1, \dots, n_i$ független valószínűségi változók, a három regularitási feltétel teljesülése és H_0^F fennállása esetén a $\sqrt{n}\mathbf{C}\hat{\mathbf{p}}$ próbastatisztika aszimptotikusan $\mathbf{0}$ várható érték vektorú, $\mathbf{C}\mathbf{V}_n\mathbf{C}^T$ kovarianciamátrixú többdimenziós normális eloszlású ($n \rightarrow \infty$).

Nagy mintaelemszám esetén a nullhipotézis tesztelésére χ^2 -próbát használhatunk, ugyanis

$$Q_n = n \cdot \hat{\mathbf{p}}^T \mathbf{C}^T \left[\mathbf{C} \hat{\mathbf{V}}_n \mathbf{C}^T \right]^+ \mathbf{C} \hat{\mathbf{p}} \sim \chi^2(f),$$

ahol f a szögletes zárójelben álló mátrix rangja (általában $d - 1$), $^+$ az általánosított inverzet jelöli, és

$$\hat{\mathbf{V}}_n = n \cdot \text{diag} \left\{ \frac{\hat{\sigma}_1^2}{n_1}, \frac{\hat{\sigma}_2^2}{n_2}, \dots, \frac{\hat{\sigma}_d^2}{n_d} \right\}.$$

Irodalomjegyzék

- [1] Bolla, M., Krámlí, A., Statisztikai következtetések elmélete. Typotex, Budapest (2005,2012).
- [2] Brunner, E., Puri, M. L., Nonparametric methods in factorial designs, *Statistical Papers* **42** (2001), 1-52.
- [3] Mardia, K. V., Kent, J. T., Bibby, J. M., Multivariate Analysis. Academic Press, London (1979).