A kozmikus térképészettől az izoton regresszióig

Németh Sándor

Abstract

1. Az euklideszi távolság-mátrix

$A_1, A_2, ..., A_n \in \mathbb{R}^m$ adott pontok ,

$d_{ij} = \|A_i - A_j\|^2$

$D = (d_{ij})$ *euklideszi távolság-mátrix, EDM*, $(D \in EDM)$.

(D szimmetrikus, azaz $d_{ij} = d_{ji}$, $d_{ij} \geq 0$ és "lyukas", azaz $d_{ii} = 0$.)

A metrikus geometria egyik alapkérdése:

Hogyan dönthető el a $D = (d_{ij})$ nem negatív elemeket tartalmazó szimmetrikus lyukas mátrixról, hogy EDM mátrix vagy sem? Más szóval, adjunk föltételeket a fönti tulajdonságokkal rendelkező D mátrixra, hogy létezzék egy $\mathbb{R}^m$ euklideszi tér és abban az $A_1, ..., A_n$ pontok úgy, hogy $d_{ij} = \|A_i - A_j\|^2$.

A feladat teljes megoldása I. J. Schoenberg nevéhez fűződik, aki egy 1935-ben publikált dolgozatában bizonyította a következő tételt:

Annak szükséges és elégséges föltétele, hogy az a_{ij} nemnegatív számok egy $\mathbb{R}^r$-beli, de nem $\mathbb{R}^{r-1}$-beli $A_0A_1...A_n$ "szimplex" élhosszai legyenek az, hogy az

$$F(x_1, x_2, ..., x_n) = \frac{1}{2}\sum_{i,k=1}^{n}(a_{0i}^2 + a_{0k}^2 - a_{ik}^2)x_i x_k$$

kvadratikus forma r-ed rangú és pozitív szemidefinit legyen.

(Itt az idézőjeles "szimplex" kifejezés egy általános esetben degenerált szimplexet jelöl; a szimplex valódi, ha $r = n$.)

Visszatérve a ma használt terminolgiához Schoenberg eredményének *egyszerűsített* formája a következőképpen fogalmazható meg:

$$D \in \mathbb{EDM} \Leftrightarrow \begin{cases} -V^T D V \in \mathbb{S}_+ \\ D \in \mathbb{S}_h, \end{cases}$$

ahol $\mathbb{S}_+$ az $n \times n$ szimmetrikus szemidefinit mátrixok kúpja, $\mathbb{S}_h$ az $n \times n$ szimmetrikus lyukas mátrixok tere, és

$$V = I - \frac{1}{n}ee^T, \quad e = (1, 1, ..., 1)^T.$$

(Ebben a megfogalmazásban nem szerepel a D rangjára vonatkozó föltétel. A V mátrix tulajdonképpen szimmetrikus, tehát $V^T = V$; itt megtartottam ay irodalomban használt jelölést.)

2. Térképkészítés pusztán távolság-viszonyok ismeretében

Tételezzük föl, hogy az $\{A_1, A_2, ..., A_n\} \subset \mathbb{R}^m$ ponthalmaz esetén a $d_{ij} = \|A_i - Aj\|^2$ távolságnégyzetek valódi értékét nem tudjuk meghatározni, de a távolságok viszonyát igen, azaz megvannak az eszközeink arra, hogy egy nagyságrendi sorrendet határozzunk meg a d_{ij} számok között:

$$d_{12} \leq ... \leq d_{ij} \leq ... \leq d_{kl}.$$

(Példának okáért vehető ezen számok gyanánt a természetes számok nem csökkenő sorozata.) Az így szerkesztett számsorozat tekinthető az $\mathbb{R}^N$ Descartes koordináta rendszerrel fölruházott euklideszi tér egy pontja koordinátáinak, ahol $N = n(n-1)/2$. Osszuk ki a tér koordinátáit olyképpen, hogy a d_{ij} pontnak (távolságnak), azaz az (i, j) indexpárnak az az r-edik x_r koordináta feleljen meg, ahanyadik helyen áll a sorozatban.

A gyakorlatban, ahol a térképkészítés feladata és sok más vele rokonítható feladat merül föl, eljárást dolgoztak ki arra, hogy a távolságviszonyokat felhasználva a valóságot jól megközelítő térképet rajzoljanak. Ennek lényege a következő:

Legyen

$$M = \{(x_1, x_2, ..., x_N) \in \mathbb{R}^N : 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq ... \leq x_N\}.$$

Az M halmaz kúp (az u.n. *pozitív monoton kúp*) az $\mathbb{R}^N$ térben és a fönti jelöléseket felhasználva

$$(d_{12}, ..., d_{ij}, ..., d_{kl}) \in M.$$

A d_{ij} értékek folyamatos javításával, a nagyságrendi sorrend betartása mellett arra törekszünk, hogy a $D = (d_{ij}) \in \mathbb{EDM}$ legyen. A kezdeti értékeknek megfelelő D_0 mátrixot tekinthetjük M elemének. Képezzük a

$$X_1 = \mathcal{V}(D_0) = -V^T D_0 V$$

mátrixot. Ha $X_1 \in S_+$, akkor Schoenberg tétele alapján $D_0 \in \mathbb{EDM}$, tehát a $\sqrt{d}_{ij}$ távolságokkal megszerkeszthető az $A_1 A_2 ... A_n$ "szimplex". Ha nem, legyen

$$Y_1 = P_{\mathbb{S}_+} X_1.$$

Az Y_1 az X_1 mátrixot az euklideszi metrika szerint legjobban megközelítő eleme az $\mathcal{S}_+$ kúpnak. Legyen továbbá

$$D_1 = P_{M \cap \mathbb{S}_h} \mathcal{V}^{\downarrow} Y_1,$$

ahol $\mathcal{V}^{\downarrow}$ a $\mathcal{V}$ általánosított inverze. A D_1 olyan nem-negatív elemeket tartalmazó szimmetrikus lyukas mátrix, amelynek d^1_{ij} elemeire $d^1_{12} \leq ... \leq d^1_{ij} \leq ... \leq d^1_{kl}$.

Legyen

$$X_2 = \mathcal{V}(D_1).$$

Ha $X_2 \in S_+$, akkor D_1 megoldása a feladatnak. Ha nem, legyen

$$Y_2 = P_{\mathbb{S}_+} X_2$$

,

$$D_2 = P_{M \cap \mathcal{S}_h} \mathcal{V}^{\downarrow} Y_2,$$

$$X_3 = \mathcal{V}(D_2),$$

Ha $X_3 \in S_+$, akkor D_2 megoldása a feladatnak. Ha nem, legyen

$$Y_3 = P_{\mathbb{S}_+} X_3,$$

$$D_3 = P_{M \cap \mathcal{S}_h} \mathcal{V}^{\downarrow} Y_3,$$

$$X_4 = \mathcal{V}(D_3),$$

és így tovább.

A (D_k) sorozat konvergens és D^* határértéke teljesíti az ennek d^*_{ij} elemeire kirótt nagyságrendi föltételeket és a $D^* \in \mathbb{EDM}$ föltételt. Tehát a $\sqrt{d^*_{ij}}$ valódi távolságokkal megszerkeszthető a kívánt "szimplex" (térkép).

Tehát a viszonylagos távolságokból kiinduló térképkészítés feladata *az M és az S_+ kúpra való alternatív projekciók segítségével oldható meg.*

Ami meglepő: az S_+ kúpra könnyű vetíteni: a vetület meghatározása a szimmetrikus mátrix sajátértékei meghatározására vezethető vissza.

Viszont az M pozitív monoton kúpra való minden vetítés egy végtelen iteratív eljárás eredménye (Neumann-Dykstra eljárás).

3. Hatékonyság-javítás

John Dattorro fölismerte, hogy az M-re való vetítésnek van egy hatékonyabb módszere, mert *M izoton projekciós kúp.* Ezzel a konvergencia két nagyságrenddel javítható.

M igen sajátos és egyszerű formájú izoton projekciós kúp.

Kell létezzen egyszerűbb eljárás!

A statisztikában az *izoton regresszió feladata* a

$$W = \{x = (x_1, ..., x_n) : x_1 \leq x_2 \leq ... \leq x_n\}$$

u. n. *monoton kúpra való vetítés* révén oldható meg.

Létezik véges hatékony módszer pl. a PAV (Pool Adjacent Violators) módszere.

A módszer egy az egyben nem vihető át M -re (ahol $0 \leq x_1$) de miután projektáltunk vele W-re az (esetleges) kezdeti negatív koordinátákat zérónak véve megkapható a vetület M-re.

Sajnos ezzel a módszerrel nem érhető el további hatékonyság javulás.

I. J. Schoenberg, Remarks to Maurice Fréchet's article “Sur la définition axiomatique d'une classe d'espace distanciés vectoriellement applicable sur l'espace de Hilbert, Ann. Math. 36(1935), 705-708.

J. Dattorro, Convex Optimization and Euclidean Distance Geometry, publisher=COandEDG version 02.24.2010.,

A. B. Németh and S. Z. Németh, How to project onto an isotone projection cone, Linear Algebra Appl., 433 (2010), 41-51.

J. de Leeuw, K. Hornik, P. Mair, Isotone optimization in R: Pool-Adjacent-Violators Algorithm (PAVA) and associative set methods, J. Statistical Software, 32(2009), 1-24.