Bor Plestenjak - Teme diplomskih nalog

Zadnja sprememba: 21. september 2009

1 Problem maksimalne korelacije

Dana je simetrična pozitivno definitna matrika $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, ki jo zapišemo v bločni obliki

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \cdots & A_{kk} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{k1} & \cdots & A_{kk} \end{bmatrix},$$

kjer je blok A_{ij} velikosti $n_i \times n_j$ in velja $n_1 + \cdots + n_k = n$. Pri problemu maksimalne korelacije (MCP) iščemo maksimum $x^T A x$ po vseh vektorjih oblike $x = [\, x_1^T \quad \cdots \quad x_k^T \,]^T$, kjer je $x_i \in \mathbb{R}^{n_i}$ in $\|x_i\|_2 = 1$.

Zadosten pogoj za lokalni ekstrem je, da obstaja vektor $x = [\, x_1^T \quad \cdots \quad x_k^T \,]^T$, kjer je $x_i \in \mathbb{R}^{n_i}$, $\|x_i\|_2 = 1$, in skalarji $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$, da velja

$$\begin{aligned} A_{11}x_1 + \cdots + A_{1k}x_k &= \lambda_1 x_1 \\ &\vdots \\ A_{k1}x_1 + \cdots + A_{kk}x_k &= \lambda_k x_k, \end{aligned}$$

kar si lahko predstavljamo kot pospošitev standardnega problema lastnih vrednosti. Ta problem lahko rešujemo s posplošitvijo potenčne metode, kjer vektor v vsakem koraku množimo z A, potem pa bločno normiramo vsako bločno komponento vektorja. Tako dobimo t.i. Horstovo metodo.

Horst je metodo predstavil leta 1961. Šele leta 1993 sta Chu in Watterson pokazala, da je metoda res lokalno konvergentna. Kar pa se tiče globalne konvergence, ta ni zagotovljena, saj tudi pri naključno izbranih začetnih vektorjih metoda pogosto skonvergira k rešitvi, ki ni optimalna. Leta 2008 sta Chu in Watterson predstavila izboljšano metodo, ki pa pri naključno izbranih začetnih vektorjih še vedno lahko skonvergira k rešitvi, ki ni maksimalna. Leta 2009 pa so Zhang, Liao in Sun pokazali, da za določene matrike lahko s primerno izbiro začetnih vektorjev dosežemo, da Horstova metoda skonvergira k maksimalni rešitvi. Za splošne matrike je problem je še vedno odprt.

V diplomskem delu naj bo predstavljen problem maksimalne korelacije, Horstov algoritem in izboljšave. Algoritme je potrebno implementirati v Matlabu in preizkusiti na numeričnih primerih.

Osnovna literatura:

- M. T. Chu, J. L. Watterson: *On a multivariate eigenvalue problem: I. Algebraic theory and power method*, SIAM J. Sci. Comput. 14 (1993) 1089–1106.
- L.-H. Zhang, M. T. Chu: *On a multivariate eigenvalue problem: II. Global solutions and the Gauss-Seidel method*, submitted to SIAM J. Sci. Comput., 2008.
- L.-H. Zhang, L.-Z. Liao, L.-M. Sun: *Towards the global solution of the maximal correlation problem*, preprint, 2009.

2 Vezan problem najmanjših kvadratov

Naj bo A realna simetrična matrika. Iščemo minimum $x^T Ax$ pri pogojih $x^T x = 1$ in $N^T x = t$, kjer je $t \neq 0$. Problem lahko preoblikujemo v ekvivalentno obliko iskanja minimuma $z^T Cz - 2b^T z$ za $z^T z = s^2$, kjer je C simetrična matrika z lastnim razcepom $C = QDQ^T$, $QQ^T = I$. Tu je $D = \mathrm{diag}(\delta_1, \cdots, \delta_n)$ matrika lastnih vrednosti

$$\delta_1 \leq \delta_2 \leq \cdots \leq \delta_n$$

in Q ortogonalna matrika lastnih vektorjev. Trje načini reševanja so:

1. Lagrangeva enačba. Iščemo minimalen λ za $Cz = \lambda z + b$, $z^T z = s^2$. Tako pridemo do iskanja najmanjše ničle funkcije $f(\lambda) = b^T (C - \lambda I)^{-2} b - s^2 = 0$, ki jo iščemo z iteracijo
$$\lambda^{(i+1)} = \lambda^{(i)} - 2\frac{f(\lambda^{(i)}) + s^2}{f'(\lambda^{(i)})} \left(\frac{\sqrt{f(\lambda^{(i)}) + s^2}}{s} - 1 \right).$$

2. Diagonalizirana Lagrangeva enačba. Če diagonaliziramo matriko C, dobimo $Du = \lambda u + d$, $u^T u = s^2$. Sedaj iščemo minimalno rešitev eksplicitne sekularne enačbe
$$f(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{d_i}{\delta_i - \lambda} \right)^2 - s^2 = 0.$$

3. Kvadratni problem lastnih vrednosti. Iščemo lastno vrednost
$$(C - \lambda I)^2 \gamma = (1/s^2) bb^T \gamma,$$
kjer je $b^T \gamma = s^2$ in $\gamma = (C - \lambda I)^{-2} b$.

V diplomskem delu naj bo opisan problem z izpeljavo in primerjavo različnih načinov reševanja. Metode naj bodo implementirane v Matlabu.

Osnovna literatura:

- W. Gander, G. H. Golub, U. von Matt: *A constrained eigenvalue problem*, Linear Algebra Appl. **144/115** (1989) 815–839.

3 PageRank vektor

Čeprav je to skrito v ozadju, delovanje medmrežnih brskalnikov, kot je npr. Google, temelji na orodjih iz numerične linearne algebre. Pri ocenjevanju pomembnosti posameznih dokumentov tako nastopa t.i. PageRank vektor, ki je levi dominantni lastni vektor matrike, ki pripada strukturi mrežnih strani in gesel. Za njegov izračun lahko uporabimo potenčno metodo, a ker so matrike ogromne in je konvergenca lahko zelo počasna, potrebujemo hitrejše metode.

Tako si lahko npr. pomagamo s kvadratno ekstrapolacijo, podprostori Krilova in drugimi metodami.

V diplomskem delu je potrebno predstaviti ozadje problema, lastnosti PageRank vektorja in metode za njegovo računanje. Metode je potrebno implementirati in preizkusiti v Matlabu.

Osnovna literatura:

- C. Brezinski, M. Redivo-Zaglia: *The PageRank vector: properties, computation, approximation, and acceleration.*, SIAM J. Matrix. Anal. Appl. 28 (2006) 551–575.

4 Eberleinova metoda za računanje lastnih vrednosti nesimetrične matrike

Vemo, da lahko lastne vrednosti simetrične matrike izračunamo preko Jacobijeve metode. Pri tej metodi z uporabo ustreznih Givensovih rotacij matriko iterativno transformiramo v matriko z vedno manjšo normo izvendiagonalnega dela. Ko je matrika dovolj blizu diagonalne matrike, so diagonalni elementi izračunani približki za lastne vrednosti.

Metodo lahko posplošimo tudi za nesimetrične matrike, kjer je znana pod imenom Eberleinova metoda. Pri nesimetričnih matrikah želimo na podoben način uničevati elemente pod diagonalo, da nam na koncu ostane le zgornja trikotna matrika. Za razliko od simetrične matrike tu konvergenca ni monotona a vseeno se da pokazati, da v številnih primerih postopek konvergira in nam vrne lastne vrednosti.

V diplomskem delu bi bilo potrebno predstaviti posplošitev Jacobijeve metode za nesimetrične matrike in pokazati, kdaj metoda deluje. V Matlabu bi bilo potrebno spogramirati delujoči algoritem in preizkusiti njegovo delovanje na numeričnih zgledih.

Osnovna literatura:

- K. Veselić: *Convergent Jacobi method for solving eigenproblem of arbitrary real matrices*, Numer. Math. **25** (1976) 179-184.
- K. Veselić: *Class of Jacobi-like procedures for diagonalizing arbitrary real matrices*, Numer. Math. **33** (1979) 157-172.
- V. Hari: *On the global convergence of the Eberlein method for real matrices*, Numer. Math. **39** (1982) 361-369.

5 Optimalni parameter za regularizacijo Tihonova

Rešujemo linearni sistem $Ax = b$, kjer je A nesingularna, a zelo občutljiva matrika velikosti $n \times n$. Predpostavimo še, da v resnici rešujemo sistem z zmoteno desno stranjo $\widetilde{b}$, kjer so poleg b prisotne še majhne motnje, npr. zaradi meritev ali zaokrožitvenih napak. Rešitev zmotenega sistema $\widetilde{x}$ lahko s pomočjo singularnega razcepa $A = U\Sigma V^T$ izrazimo kot

$$\widetilde{x} = \sum_{i=1}^{n} \frac{u_i^T \widetilde{b}}{\sigma_i} v_i.$$

Če ima matrika A najmanjše singularne vrednosti blizu 0, lahko zelo majhna motnja desne strani povsem pokvari rezultat in $\widetilde{x}$ se lahko močno razlikuje od x.

Tovrstne težave rešujemo z regularizacijo, kjer želimo izločiti tiste komponente v razvoju $\widetilde{x}$ po desnih singularnih vektorjih v_i, ki so preveč okužene z napako. Ena glavnih metod je regularizacija Tihonova, kjer izberemo regularizacijski parameter $\alpha > 0$ in iščemo vektor x, ki reši predoločeni problem:

$$\min_x \left\{ \|b - Ax\|_2^2 + \alpha^2 \|x\|^2 \right\}.$$

Vrednost α moramo primerno izbrati. Če pošljemo α proti 0, potem bo x kar rešitev sistema $Ax = b$, a ker je v b tudi šum, lahko potem pričakujemo, da bo norma dobljenega vektorja zelo velika. Po drugi strani, če vzamemo velik α, potem je bolj bistveno to, da ima x majhno normo, kot to, da reši sistem $Ax = b$. Pri primerni izbiri α norma izračunanega vektorja x ne bo prevelika in hkrati tudi velikost ostanka $b - Ax$ ne bo prevelika.

Predstaviti je potrebno regularizacijo Tihonova in algoritme za izračun optimalnega parametra α, kot so npr. CSV, L-curve, itd. Algoritme je potrebno implementirati v Matlabu in preizkusiti na na numeričnih primerih.

Osnovna literatura:

- L. Eldén, *Algorithms for the regularization of ill-conditioned least squares problems*, BIT 17 (1997) 134–145.
- P. C. Hansen, J. G. Nagy, D. P. O'Leary: *Deblurring images: Matrices, Spectra and Filtering*, SIAM, 2006

6 Natančno računanje singularnih vrednosti bidiagonalnih matrik

Pri računanju singularnih vrednosti problem najprej z ortogonalno podobnostno transformacijo prevedemo na računanje singularnih vrednosti bidiagonalne matrike B. Ena možnost za računanje je implicitna uporaba Choleskega LR algoritma na tridiagonalni simetrični in pozitivni matriki $B^T B$.

V osnovi pri Choleskem LR algoritmu začnemo s s.p.d. matriko $A_0 = A$, nato pa v zanki računamo razcep Choleskega $A_k = V_k V_K^T$ in zmnožimo nazaj v $A_{k+1} = V_k^T V_k$. Dva koraka te metode sta ekvivalenta enemu koraku QR algoritma brez premikov, seveda pa lahko dodamo tudi premike.

Na prvi pogled se zdi, da morajo biti premiki izbrani tako, da bo matrika $A_k - \sigma_k I$ spet pozitivno definitna, saj sicer razcep Choleskega ne obstaja, a je možno vseeno razviti algoritem, ki bo deloval tudi v takšnih primerih. Tako pridemo do t.i. qd, dqd, dqds, in qds algoritmov.

V diplomskem delu je potrebno predstaviti tovrstne algoritme za računanje singularnih vrednosti, poseben poudarek je na tem, da je možno z nekaterimi različicami tudi najmanjše singularne vrednosti izračunati z veliko relativno natančnostjo.

Algoritme je potrebno sprogramirati v Matlabu in primerjati njihovo delovanje na nekaj numeričnih zgledih.
Osnovna literatura:

- K. V. Fernando, B. N. Parlett: *Accurate singular values and differential qd algorithms*, Numer. Math. **67** (1994) 191-229.
- J. Demmel, W. Kahan: *Accurate singular values of bidiagonal matrices*, SIAM J. Sci. Stat. Comput. **11** (1990) 873-912.