31.08.2006, Berlín

Posudek disertační práce

Krylov Subspace Approximations in Linear Algebraic Problems

RNDr. Ivety Hnětynkové,
Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy, Praha,
obor: Vědecko-technické výpočty

Předložená disertační práce se zabývá studiem metod využívajících Krylovových prostorů při řešení lineárních algebraických problémů. Konkrétněji, první část disertační práce je věnována problému konvergence implicitně restartované Arnoldiho metody (IRA), druhá část práce se zabývá lineárními aproximačními problémy a studiem vlastností core problému. Obě studované tématiky jsou zajímavé jak z teoretického tak i praktického hlediska. Práce obsahuje shrnutí dosud známých výsledků, ale i výsledky původní, které autorka publikovala v recenzovaném časopise (společný článek se Z. Strakošem) a zaslala k publikaci (společná práce s J. Zítkem).

První část práce je rozdělena do čtyř kapitol. Úvodní kapitola definuje základní pojmy a algoritmy používané v disertační práci. Obsahuje přehled zahrnující algoritmy na konstrukci báze Krylovova prostoru založené na Arnoldiho procesu, metodu GMRES, popis konstrukce adaptivních předpodmiňovačů ze znalosti invariantního prostoru uvažované matice soustavy a přehled známých aproximačních vlastností Ritzových a harmonických Ritzových čísel. Tato kapitola je dobře a přehledně zpracována.

Druhá kapitola seznamuje čtenáře s implicitně restartovanou Arnoldiho metodou (IRA), která je vhodná k nalezení dobré aproximace několika vlastních čísel a korespondujících vlastních vektorů uvažované matice A. IRA je úzce spojena s aplikací tkzv. polynomiálních filtrů (polynomů aplikovaných na matici A), které "vyfiltrovávají" či "tlumí" nechtěnou část spektra. Polynomiální filtry jsou určené skrze své kořeny (shifty v IRA metodě). Za shifty v IRA metodě je obvyklé brát Ritzova čísla získaná z Arnoldiho rozkladu. Nicméně, již v původní práci D. Sorensena (1992) a později v knize "Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems" (2000) je uvažována možnost použít kořeny Čebyševova polynomu, majícího "tlumící" vlastnost na množině obsahující nechtěnou část spektra matice. Nemyslím si, že při aplikaci Čebyševova filtru jde o nové pojetí (new approach, str. 12) nebo novou techniku (new technique, str. 35). Spíše jde o aplikaci standardních a známých technik popsaných v pracech T. Manteuffela (1977, 1978) a Y. Saada (1984), resp. o algoritmické zpracování dané situace ("alternating of intervals").

Bezesporu nejzajímavější kapitolou v první části disertační práce je kapitola třetí, zabývající se konvergencí metody IRA. Výsledky v této kapitole jsou původní a představují určité zobecnění výsledků D. Sorensena (1992). Ve zmíněné práci D. Sorensena bylo ukázáno, že pokud má polynomiální filtr požadované "tlumící" vlastnosti, IRA metoda s konstantními shifty konverguje (nalezne invariantní podprostor). Sorensen zároveň podává intuitivní vysvětlení, proč IRA metoda konverguje i v případě nekonstantních (ale konvergujících) posloupností shiftů. Autorka zde posuzované disertační práce vyšla z právě popsané situace. Uvažuje IRA metodu s nekonstantními ale konvergujícími shifty a dokazuje konvergenci IRA metody v tomto případě. Bohužel, hlavního výsledku bylo dosaženo za určitých omezujících předpokladů (Assumption 1 and 4). Assumption 1 nemusí být splněna například tehdy, když jsou vlastní čísla matice A korelována s limitami posloupností shiftů (např. s kořeny "limitních" Čebyševových polynomů nebo s limitami posloupností Ritzových čísel v případě klasických filtrů). V druhé části této kapitoly je analyzován případ, kdy má nejmenší vlastní číslo matice A geometrickou násobnost větší než 1. Je ukázána zajímavá skutečnost, že v tomto případě nalezne IRA pouze část invariantního podprostoru příslušného k nejmenšímu vlastnímu číslu a proto je nutné při aplikaci IRA testovat všechny poddiagonální prvky updatované horní Hessenbergovy matice.

Čtvrtá kapitola je věnována numerickým experimentům. Na akademických (speciálních) příkladech je demonstrováno splnění předpokladů potřebných k důkazu konvergence IRA s nekonstantními shifty. Následuje ukázka chování IRA v aritmetice s konečnou přesností (ztráta ortogonality v Arnoldiho bázi). V druhé části numerických experimentů je použita IRA metoda v souvislosti s klasickým a Čebyševovým filtrem ke konstrukci předpodmiňovačů pro metodu GMRES. Téměř ve všech experimentech vychází lepší výsledky pro Čebyševův filtr. Podle mého názoru nejsou výsledky této kapitoly zcela objektivní a nesnaží se zodpovědět otázku "proč" a "kdy" Čebyševovy filtry fungují a jsou efektivnější než filtry klasické. Pokud autorka chtěla numericky studovat a srovnávat dva druhy filtrů, bylo zřejmě vhodné vybrat testovací množinu matic s různým rozložením spektra v komplexní rovině (pro normální matice), popřípadě intuitivně vysvětlit chování filtru pro nenormální matice např. pomocí ε-pseudospektra matice. Místo toho byly zvoleny matice pouze s reálným spektrem (akademické, Watt1, Sherman4, u příkladu 5 na str. 73 nevím). Navíc, čtenář o spektru těchto matic není většinou informován, ačkoliv je jasné, že v případě normálních matic hraje spektrum rozhodující roli při výkonnosti filtru. Myslím si, že nevhodně zvolená testovací množina matic vede čtenáře k mylného dojmu, že Čebyševův filtr je většinou efektivnější než filtr klasický.

První část disertační práce se zabývá velmi složitým a komplikovaným tématem, konvergencí IRA metody používající nekonstantní shifty a aplikované na obecnou nesymetrickou matici. V těchto těžkých případech je cenný každý výsledek, který přispívá k pochopení fungování metod. Ačkoliv výsledky dosažené v první části disertační práce mají určitá omezení, autorka prokázala, že je schopná samostatně analyzovat a řešit obtížné problémy.

Druhá část disertační práce je věnována lineárním aproximačním problémům a studiu vlastností core problému. Tato část práce je rozdělena do dvou kapitol, kapitoly páté zasvěcující čtenáře do problematiky lineárních aproximačních problémů a kapitoly šesté, obsahují vlastní výsledky, které jsou důležitým přínosem k teorii core problému.

Kapitola pátá velmi pěkným a přehledným způsobem shrnuje problematiku lineárních aproximačních problémů a svědčí o uspořádaném myšlení autorky. V úvodu kapitoly je definován lineární aproximační problém s praktickými příklady, kde takovéto problémy vznikají. Řešení aproximačního problému lze hledat v různém smyslu ("ordinary least squares", "data least squares", a obecně "scaled total least squares"). Autorka popisuje formulace jednotlivých metod a vyjasňuje podmínky pro existenci a jednoznačnost řešení daných problémů. Aproximační problémy jsou často velmi špatně podmíněné a zatížené chybami modelu a měření. V takovýchto situacích je potřeba použít regularizačních technik, jejiž přehled lze nalézt v odstavci 5.3. Mnoho těchto technik je založeno na Golub-Kahanově bidiagonalizaci, silném matematickém nástroji, který je užitečný jak z teoretického tak i praktického hlediska. Závěr kapitoly je věnován diskusi o problematice zastavovacích kritérií a využití Golub-Kahanovy bidiagonalizace a core teorie při řešení tohoto problému. Kapitola pátá tak přirozeným způsobem motivuje kapitolu poslední obsahující nové vědecké poznatky.

Kapitola šestá začíná shrnutím hlavní myšlenky core teorie C. C. Paige a Z. Strakoše. Tato idea spočívá v ortogonální transformaci původního aproximačního problému do blokové podoby, která umožňuje oddělit nutné a postačující informace pro řešení problému od nadbytečných informací. Následují původní výsledky autorky disertace, které novým a elegantním způsobem dokazují známé fundamentální vlastnosti core problému. Idea důkazu je velmi jednoduchá a jasná. Na Golub-Kahanovu bidiagonalizaci, která je použita při výpočtu core problému, lze nahlížet jako na Lanczosovu tridiagonalizaci. Na základě dobře známých vlastností Lanzcosovy tridiagonalizace a korespondujících Jacobiho matic lze dokázat vlastnosti samotného core problému. V závěru kapitoly je naznačena možnost dalšího využití vztahu Golub-Kahanovy bidiagonalizace a Lanzcosovy tridiagonalizace při rozhodování, kdy je spočtená částečná bidiagonální matice dobrou aproximací bidiagonální matice původního core problému (formulace zastavovacího kritéria).

Druhá část disertační práce studuje z praktického hlediska velmi užitečnou problematiku a přináší nové fundamentální teoretické výsledky, které považuji za nejvýznamnější přínos této disertační práce. Tyto výsledky budou mít pravděpodobně i přímý praktický dopad při formulaci efektivních zastavovacích kritérií v regularizačních metodách.

Práce je jako celek napsána pečlivě a v dobré grafické i formální úpravě. Ačkoliv není úplně bez nedostatků (které se týkají hlavně první části disertace), práce určitě splňuje požadavky kladené na disertační práci. Klady a přednosti disertační práce rozhodně převyšují zmíněné nedostatky. Autorka prokázala, že je schopna řešit složité matematické problémy. Druhá část disertační práce svědčí o metodickém nadání autorky a schopnosti proniknout do jádra problému, jakož i vidět daný problém v různých souvislostech.

Závěr: *Předložená práce se zabývá zajímavými a aktuálními tématy a obsahuje nové vědecké poznatky, částečně již publikované v recenzovaných časopisech. Disertační práce prokazuje předpoklady autorky k samostatné tvořivé práci. Jednoznačně doporučuji, aby na základě předložené disertační práce byla RNDr. Ivetě Hnětynkové přiznána hodnost "Ph.D.".*

Berlín, 31. srpna 2006

Petr Tichý