MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ FAKULTA
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Martina Sotáková

Problém nejbližší korelační matice

Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí bakalářské práce:	RNDr. Michal Pešta, Ph.D.
Studijní program:	Matematika
Studijní obor:	Obecná matematika

Praha 2017

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne 20. 7. 2017 Martina Sotáková

Na tomto mieste by som chcela poďakovať vedúcemu práce, RNDr. Michalovi Peštovi, Ph.D., za vedenie práce, všetky užitočné rady, pripomienky a čas.
Vďaka patrí taktiež rodine, priateľom a Lukášovi za prejavenú podporu.

Název práce: Problém nejbližší korelační matice

Autor: Martina Sotáková

Katedra: Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Michal Pešta, Ph.D., Katedra pravděpodobnosti a matematické statistiky

Abstrakt: Táto práca sa zaoberá problémom nájdenia najbližšej korelačnej matice k danej symetrickej matici, ktorých vzdialenosť je meraná vzhľadom ku Frobeniovej norme. Teoretická časť opisuje metódu pre nájdenie riešenia tohto problému na základe duálneho prístupu a aplikácie Newtonovej metódy. Ďalej je táto metóda modifikovaná pre iné prípady. V praktickej časti je teória aplikovaná na jednoduchých príkladoch.

Klíčová slova: najbližšia korelačná matica, optimalizácia, metóda gradientu, pozitivne semidefinitná matica

Title: Problem of the nearest correlation matrix

Author: Martina Sotáková

Department: Department of Probability and Mathematical Statistics

Supervisor: RNDr. Michal Pešta, Ph.D., Department of Probability and Mathematical Statistics

Abstract: This work deals with the problem of finding the correlation matrix closest to the given symetric matrix, the distance of which is measured considering the Frobenius norm. The theoretical part of the thesis describes a method used for finding the solution to this problem based on the dual approach and application of Newton method. The method is further modified for other cases. In the practical part we apply the theory to simple math problems.

Keywords: nearest correlation matrix, optimization, gradient method, positive semi-definite matrix

Obsah

Úvod

Témou tejto práce je problém nájdenia najbližšej korelačnej matice k danej symetrickej matici. Najčastejšie sa s týmto problémom môžeme stretnúť v sfére financií, kde je meraná korelácia medzi dvoma aktívami k vytvoreniu rozumného portfólia. Bohužiaľ, korelácia medzi dvoma aktívami môže byť meraná po nejakom časovom úseku a môže sa stať, že niektoré data môžu chýbať. Jedným zo spôsobov môže byť spočítať korelácie s použitím údajov z dní, kde sú oba údaje dostupné. Takto sa ale dostaneme len k aproximovanej korelačnej matici, ktorá nesplĺňa všetky vlastnosti korelačnej matice. Preto sa nám ponúka problém najbližšej korelačnej matice.

Cieľom práce bude sformulovať tento problém a opísať teóriu k nájdeniu riešenia. Vychádzajúc z prác [Qi a Sun (2006)] a [Borsdorf (2007)], ktoré sú ťažiskové, načrtneme danú teóriu a predstavíme algoritmi na riešenie problému. Tieto algoritmi budeme neskôr v simulácii porovnávať.

Práca je rozčlenená do troch kapitol. V prvej kapitole si zavedieme základné pojmy, ktoré využijeme pri stavbe teórie. V druhej kapitole nazrieme na formuláciu primárneho a duálneho problému . Pre nájdenie riešenia duálneho problému odvodíme metódu, ktorá využíva Newtonovej metódy tak, aby dosahovala kvadratický rád konvergencie. Túto metódu modifikujeme pre prípady s W-váhou a H-váhou. Ďalej načrtneme modifikáciu algoritmu, ktorá využíva predpodmieňovanie. V poslednej kapitole sa budeme venovať aplikácii algoritmov a ich porovnaniu na rôznych testovacích datach.

1. Základné pojmy a značenia

V tejto kapitole nazrieme na základné pojmy a značenia, na ktorých budeme rozvíjať teóriu.

Definícia 1. *Nech $X_1, \ldots, X_n$ sú náhodne veličiny definované na pravdepodobnostnom priestore $(\Omega, \mathcal{A}, P)$. Korelačnou maticou $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n$ rozumieme maticu s jednotkovými prvkami na hlavnej diagonále a prvkami $(a_{ij}) = corr(X_i, X_j)$, i,j=1,...,n.*

Definícia 2. *Nech $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Povieme, že A je pozitívne definitná matica, ak pre ľubovoľné $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$ platí $x^\top Ax > 0$. Povieme, že A je pozitívne semidefinitná matica, ak pre ľubovoľné $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$ platí $x^\top Ax \geq 0$.*

Tvrdenie 1. *Nech A je korelačná matica odpovedajúca náhodnému vektoru $\boldsymbol{X} = (X_1, \ldots, X_n)$. Potom A je symetrická pozitívne semidefinitná matica.*

Dôkaz. Zvoľme $y \in \mathbb{R}^n$. Potom máme

$$\begin{aligned} y^\mathsf{T} Ay &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i a_{ij} y_j = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i \frac{E((X_i-\mu_i)(X_j-\mu_j))}{\sqrt{\sigma_i^2\sigma_j^2}} y_j = \\ &= E\left(\sum_{i=1}^n y_i \frac{(X_i-\mu_i)}{\sqrt{\sigma_i^2}} \sum_{j=1}^n y_j \frac{(X_j-\mu_j)}{\sqrt{\sigma_j^2}}\right) = \\ &= E\left(\left(\sum_{i=1}^n y_i \frac{(X_i-\mu_i)}{\sqrt{\sigma_i^2}}\right)^2\right) \geq 0, \end{aligned}$$

kde $E(X)$ je stredná hodnota náhodnej veličiny X, $\mu_i := E(X_i)$ a $\sigma_i^2 := var(X_i)$. Pretože y bolo volené ľubovoľne, výsledkom je, že A je pozitívne semidefinitná. Symetriu dostaneme z

$$\begin{aligned} a_{ij} = corr(X_i, X_j) &= E\left(\frac{(X_i-\mu_i)(X_j-\mu_j)}{\sqrt{\sigma_i^2\sigma_j^2}}\right) = \\ &= E\left(\frac{(X_j-\mu_j)(X_i-\mu_i)}{\sqrt{\sigma_j^2\sigma_i^2}}\right) = corr(X_j, X_i) = a_{ji} \end{aligned}$$

pre všetky i,j=1,...,n.

□

Definícia 3. *Nech $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ je matica. Frobeniovou normou matice A rozumieme*

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}.$$

Definícia 4. *Priestor H nazveme Hilbertovým priestorom, ak H je úplný reálny alebo komplexný vektorový priestor so skalárnym súčinom, ktorý indukuje normu na priestore.*

Poznámka. Definujme operátor $\langle .\,,.\rangle : \mathbb{R}^{n\times n} \longrightarrow \mathbb{R}^n$ ako

$$\langle X,Y\rangle := \mathrm{trace}(X^\top Y) = \sum_{i,j=1}^{n} X_{ij}Y_{ij}\,, \quad X,Y \in \mathbb{R}^{n\times n} \tag{1.1}$$

Ukážeme, že v prípade (1.1) sa jedná o skalárny súčin na Hilbertovom priestore $\mathbb{R}^{n\times n}$:

- linearita v prvej zložke
  $\langle X+Z,Y\rangle = \mathrm{trace}((X+Z)^\top Y) = \sum_{i,j=1}^{n}(X_{ij}Y_{ij} + Z_{ij}Y_{ij})$
  $= \sum_{i,j=1}^{n}(X_{ij}Y_{ij}) + \sum_{i,j=1}^{n}(Z_{ij}Y_{ij}) = \langle X,Y\rangle + \langle Z,Y\rangle$,
- symetria
  $\langle X,Y\rangle = \mathrm{trace}(X^\top Y) = trace(Y^\top X) = \langle Y,X\rangle$,
- $\langle X,X\rangle = \mathrm{trace}(X^\top X) = \sum_{i,j=1}^{n} X_{ij}^2 \geq 0 \Rightarrow (\langle X,X\rangle = 0 \Leftrightarrow X = 0)$.

2. Newtonova metóda

Táto kapitola sa bude venovať hľadaniu riešenia problému nájdenia najbližšej korelačnej matice. Pre nájdenie riešenia zadefinujeme duálny problém, ktorého riešenie nájdeme pomocou Newtonovej metódy. Ďalej túto metódu modifikujeme pre podobné prípady. Teória, ktorú predstavíme, je podrobne opísaná v [Borsdorf (2007)] a [Qi a Sun (2006)].

2.1 Základná verzia

2.1.1 Priblíženie problému

Problém nájdenia najbližšej korelačnej matice k danej symetrickej matici vieme vyjadriť ako konvexný optimalizačný problém

$$\begin{aligned} &\min \quad \frac{1}{2}\|G - X\|_F^2, \quad G \in S^n \text{ daná} \\ &\text{s.t.} \quad \operatorname{diag}(X) = e \quad \text{a} \quad X \in S_+^n\,, \end{aligned} \tag{2.1}$$

kde S^n je množina symetrických matíc v Hilbertovom priestore $\mathbb{R}^{n\times n}$, $S_+^n \subset S^n$ je množina symetrických pozitívne semidefinitných matíc, diag(X) je operátor vytvárajúci vektor z diagonálnych prvkov matice X a e je jednotkový vektor v $\mathbb{R}^n$. Podmienky nám zaručujú, že hľadaná matica X bude korelačnou maticou. Z [Malick (2004), kapitola 4] vieme, že množina prípustných riešení duálneho problému k problému (2.1) je neohraničená a duálny problém je tvaru

$$\begin{aligned} &\min_{y\in\mathbb{R}^n} \theta(y) := \frac{1}{2}\|(G + \operatorname{Diag}(y))_+\|_F^2 - e^\top y \\ &\text{s.t.} \quad \operatorname{diag}((G + \operatorname{Diag}(y)_+)) = e, \end{aligned} \tag{2.2}$$

kde Diag(y) je lineárny operátor, ktorý vytvorí maticu s prvkami y na hlavnej diagonále a mimo diagonálu má nulové prvky. Operátor $(.)_+ : \mathcal{S}^n \longrightarrow \mathcal{S}_+^n$ je projekcia na množinu $\mathcal{S}_+^n$ [Higham (2002), kapitola 3], teda

$$(C)_+ := P \begin{pmatrix} \max(\lambda_1,0) & & \\ & \ddots & \\ & & \max(\lambda_n,0) \end{pmatrix} P^\top$$

pre C ľubovoľnú symetrickú maticu, ktorá má spektrálny rozklad

$$C = P \operatorname{Diag}(\lambda) P^\top$$

s P ortogonálnou a $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ vektorom vlastných čísel C. Že sa jedná naozaj o duálnu úlohu k nášmu problému sa dá odvodiť na základe Lagrangeovho duálneho prístupu. Toto odvodenie môžeme nájsť v [Borsdorf (2007), kapitola 2.1.2].

Duálny problém je dobre definovaný, teda existuje práve jedno riešenie. Naša duálna funkcia $\theta(y)$ je konvexná, teda pre $x,y \in \mathbb{R}^n$ a $t \in (0,1)$ platí

$$
\begin{aligned}
\theta(tx+(1-t)y) &= \frac{1}{2}\|G+\mathrm{Diag}(tx+(1-t)y)\|_F^2 - e^\top(tx+(1-t)y)\\
&= \frac{1}{2}\|tG+t\mathrm{Diag}(x)+(1-t)(G+\mathrm{Diag}(y))\|_F^2 - e^\top(tx+(1-t)y)\\
&\leq t(\frac{1}{2}\|G+\mathrm{Diag}(x)\|_F^2 - e^\top x)+(1-t)(\frac{1}{2}\|G+\mathrm{Diag}(y)\|_F^2 - e^\top y)\\
&= t\theta(x)+(1-t)\theta(y),
\end{aligned}
$$

kde v tretej nerovnosti sme využili trojhuholníkovú nerovnosť a vytknutie skaláru z normy. $\theta(y)$ je taktiež spojite diferencovateľná a jej gradient sa rovná

$$\nabla\theta(y) = \mathrm{diag}(G+\mathrm{Diag}(y))_+ - e. \tag{2.3}$$

Lemma 2. *Nech H je Hilbertov priestor, C je uzavretá konvexná podmnožina v H a $\Pi_C : H \longrightarrow C$ operátor projekcie na C. Potom pre všetky $x_1,x_2 \in H$ platí*

$$\|\Pi_C(x_1) - \Pi_C(x_2)\| \leq \|x_1 - x_2\|.$$

Dôkaz. [Borsdorf (2007), lemma 2.1.1]

□

Pre ďalšie použitie ukážeme, že (2.3) je lipchitzovská, to je pre $f : \Omega \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ existuje konštanta $K > 0$ taká, že pre $\forall x,y \in \mathbb{R}^n$ platí $\|f(x)-f(y)\| \leq K\|x-y\|$. Zvloľme $y_1,y_2 \in \mathbb{R}^n$ a aplikujme lemma 2 s $H := S^n \subset \mathbb{R}^{n\times n}$, na ktorom je definovaný skalárny súčin ako v (1.1), $C := S^n_+$, $\Pi_C := (.)_+$ a dostávame

$$
\begin{aligned}
\|\nabla\theta(y_1)-\nabla\theta(y_2)\| &= \|\mathrm{diag}(G+\mathrm{Diag}(y_1))_+ - \mathrm{diag}(G+\mathrm{Diag}(y_2))_+\|\\
&\leq \|(G+\mathrm{Diag}(y_1))_+ - (G+\mathrm{Diag}(y_2))_+\|_F\\
&\leq \|\mathrm{Diag}(y_1)-\mathrm{Diag}(y_2)\|_F\\
&\leq \|y_1-y_2\|\,,
\end{aligned}
$$

teda sme ukázali, že $\theta(y)$ je lipchitzovská s konštantou 1.

Ako sme už zmienili vyššie, duálny problém má práve jedno riešenie. Stále ale nevieme, ako vyzerá riešenie primárnej úlohy. To nám zodpovie nasledujúca veta:

Veta 3. *Ak y_* je riešenie duálneho problému (2.2), potom riešením pôvodného problému (2.1) je*

$$X_* = (G+\mathit{Diag}(y_*))_+. \tag{2.4}$$

Dôkaz. [Borsdorf (2007), Theorem 2.1.2]

□

2.1.2 Hľadanie riešenia

V tejto časti ukážeme, ako nájdeme riešenie duálneho problému y_* tak, aby metóda bola konvergentná v kvadratickom ráde. Našim hlavným cieľom bude aplikovať nepresnú Newtonovu metódu na funkciu $\theta(y)$. K tomu, aby sme túto metódu predstavili, potrebujeme pár základných pojmov, od ktorých sa budeme odrážať.

Predpokladajme zobrazenie $\Phi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$, ktoré je lipschitzovské. Položme $D_\Phi = \{x \in \mathbb{R}^n | \Phi \text{ je diferencovateľné v x}\}$.

Definícia 5. *Nech $\Phi : U \subseteq \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$, U otvorená, je lipschitzovské v $x \in U$.*

(a) Množinu $\partial_B \Phi(x) := \{G \in \mathbb{R}^{n\times m} : \exists \{x_k\} \subset D_\Phi, x_k \longrightarrow x, \nabla\Phi(x_k) \longrightarrow G\}$ nazývame B-subdiferenciálom Φ v bode x.

(b) Množinu $\partial\Phi(x) = conv(\partial_B\Phi(x))$ nazývame generalizovaným Jakobiánom, kde conv značí konvexný obal.

Definícia 6. *Nech $\Phi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ je lipchitzovské. Povieme, že Φ je silno polohladká (angl. strongly semismooth), ak pre $x \in \mathbb{R}^n$ platí*

- *Φ je diferencovateľná v smere x,*
- *pre ľubovoľné $V \in \partial\Phi(x+h)$ platí*

$$\Phi(x+h) - \Phi(x) - Vh = \mathcal{O}(\|h\|^2).$$

Newtonova metóda pre systém nehladkých funkcií hľadajúcich riešenie sústavy $\Phi(x) = 0$ je daná tvarom

$$x_{k+1} = x_k - V_k^{-1}\Phi(x_k), \tag{2.5}$$

kde Φ je lipchitzovská, $V_k \in \partial\Phi(x_k)$, $k \in \mathbb{N}_0$ a x_0 je východzí bod. Nasledujúca veta zhrňuje výsledok konvergencie tejto metódy.

Veta 4. *Nech x_* je riešenie rovnice $\Phi(x) = 0$ a nech Φ je lipchitzovská funkcia, ktorá je silno polohladká v x_*. Predpokladajme, že všetky $V \in \partial\Phi(x_*)$ sú regulárne matice. Potom každá postupnosť generovaná (2.5) konverguje kvadraticky k x_* za predpokladu, že x_0 je dostatočne blízko riešeniu x_*.*

Dôkaz. [Qi a Sun (1993), Theorem 3.2]

□

2.1.3 Aplikácia na náš problém

Definujme funkciu $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ ako

$$F(y) := \mathrm{diag}((G + \mathrm{Diag}(y))_+) = \nabla\theta(y) + e.$$

Podľa [Qi a Sun (2006), kapitola 1] je y riešením rovnice $F(y) = e$. Položme ∂F ako generalizovaný Jakobián funkcie F. Poznamenajme, že ∂F je taktiež generalizovaným Jakobiánom funkcie $\nabla\theta(y)$, keďže e je konštanta. F je lipchitzovská, pretože pre x,$y \in \mathbb{R}^n$ platí

$$\|F(x) - F(y)\| = \|\nabla\theta(x) + e - \nabla\theta(y) - e\| = \|\nabla\theta(x) - \nabla\theta(y)\|$$

a o funkcii $\nabla\theta$ sme už vieme, že lipchitzovská je. To, že F splňuje predpoklad silnej polohladkosti nájdeme v [Qi a Sun (2006), strana 364]. Uvažujme teda Newtonovu metódu (2.5) pre $\Phi(y) = F(y) - e$. Aby sme mohli aplikovať vetu 4, potrebujeme ukázať, že všetky prvky $V \in \partial F(y_*)$ sú regulárne matice. K tomu nám stačí dokázať, že všetky $V \in \partial F(y_*)$ sú pozitívne definitné, regularita potom plynie z vlastnosti, že vlastné čísla pozitívne definitnej matice sú väčšie ako nula. Naviac, aby sme boli schopní skonštruovať postupnosť $\{y_k\}_{k=0}^{\infty}$, potrebujeme vyjadriť nejaký prvok $V_k \in \partial F(y_k)$ pre všetky $k \in \mathbb{N}_0$.

Pre dôkaz pozitívnej definitnosti prvkov z $\partial F(y_*)$ zavedieme nasledujúce značenia. Pre $X \in \mathcal{S}^n$ označme $\lambda(X)$ vektor vlastných čísel matice X, ktoré budú usporiadané od najmenšieho po najväčšie, to je $\lambda_1(X) \geq \lambda_2(X) \geq \cdots \geq \lambda_n(X)$. Nech $\mathcal{O}$ je množina všetkých ortogonálnych matíc v $\mathbb{R}^{n \times n}$ a nech $\mathcal{O}_X$ je

$$\mathcal{O}_X := \{P \in \mathcal{O} \mid X = P\mathrm{Diag}[\lambda(X)]P^\top]\},$$

kde P je matica zostavená z vlastných vektorov matice X.

Definícia 7. *Nech $f : \mathcal{S}^n \longrightarrow \mathcal{S}^n$ a $X \in \mathcal{S}^n$. Potom maticovú funkciu $f(X)$ definujeme ako*

$$f(X) := PDiag[f(\lambda_1(X)),f(\lambda_2(X)),\ldots,f(\lambda_n(X))]P^\top, \quad P \in \mathcal{O}_X.$$

Pre $\mu = (\mu_1,\ldots,\mu_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ také, že f je diferencovateľná v $\mu_1,\ldots,\mu_n$ definujeme $n \times n$ symetrickú maticu $f^{[1]}(\mu)$, ktorej prvky na mieste (i,j) majú tvar

$$\left(f^{[1]}(\mu)\right)_{ij} = \begin{cases} \frac{f(\mu_i)-f(\mu_j)}{\mu_i-\mu_j} & \text{pre } \mu_i \neq \mu_j \\ f'(\mu_i) & \text{pre } \mu_i = \mu_j. \end{cases}$$

Po zbytok kapitoly predpokladajme, že $f(x) = x_+ := max\{0,t\}$, $t \in \mathbb{R}$, teda pre $X \in \mathcal{S}^n$ platí

$$X_+ = f(X) = P\mathrm{Diag}\left(max\{\lambda_1(X),0\},\ldots,max\{\lambda_n(X),0\}\right)P^\top.$$

Podľa Lemmatu 3.1 v Qi a Sun (2006) poznáme vyjadrenie derivácie f, to je pre $H \in \mathcal{S}^n$ dostávame

$$f'(X)H = P\left(f^{[1]}(\lambda(X)) \circ (P^\top HP)\right)P^\top, \tag{2.6}$$

kde pre $A,B \in \mathcal{S}^n$ je $A \circ B = [A_{ij}B_{ij}]_{i,j=1}^n$. Za predpokladu, že $\lambda_i(X) \neq 0$ pre všetky $i = 1,\ldots,n$, dostávame vyjadrenie derivácie projkecie na $\mathcal{S}_+^n$ v X ako v (2.6) s $f(x) = x_+$ a $H \in \mathcal{S}^n$. Ďalej položme

$$C(y) := G + \mathrm{Diag}(y) \quad \text{a} \quad \lambda(y) := \lambda(C(y))$$

a označme množiny, ktoré sú spojené s $\lambda(y)$ ako

$$\alpha = \alpha(y) = \{i \mid \lambda_i(y) > 0\}, \beta = \beta(y) = \{i \mid \lambda_i(y) = 0\}, \gamma = \gamma(y) = \{i \mid \lambda_i(y) < 0\}.$$

Obdobné značenie zavedieme aj pre riešenie duálneho problému y_*. Vieme, že F je diferencovateľná v y práve vtedy, keď f je diferencovateľná v $C(y)$ [Qi a Sun (2006), Lemma 3.4]. Túto znalosť využijeme pre nasledujúce lemma:

Lemma 5. *Pre ľubovoľné $h \in \mathbb{R}^n$ máme*

$$\partial_B F(y_*)h \subseteq \{diag(W_y H) : W_y \in \mathcal{W}_y\}$$

kde $H = Diag(h)$ a

$$\mathcal{M}_y := \left\{ M_y \in \mathbb{R}^{n\times n} \mid M_y = \begin{pmatrix} E_{\alpha_*\alpha_*} & E_{\alpha_*\beta_*} & \tau \\ E_{\beta_*\alpha_*} & 0 & 0 \\ \tau & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tau = \left(\frac{\lambda_i(y_*)}{\lambda_i(y_*) - \lambda_j(y_*)} \right)_{\substack{i \in \alpha_* \\ j \in \gamma_*}} \right\}$$

$$\mathcal{W}_y := \{W_y \mid W_y H = P(M_y \circ (P^\top H P))P^\top, P \in \mathcal{O}_{C(y_*)}, M_y \in \mathcal{M}_y, h \in \mathbb{R}^n\}$$

Dôkaz. [Qi a Sun (2006), Lemma 3.5]

□

Poznámka. Matica $E_{n,m}$ zmienená v lemmate 5 značí maticu s jednotkovými prvkami, ktorá je rozmeru $n \times m$.

Nasledujúcou vetou dokážeme, že množina $\partial F(y_*)$ je množinou pozitívne definitných matíc, čo sme potrebovali ukázať pre užitie vety 4.

Veta 6. *Každý prvok $V \in \partial_B F(y_*)$ je pozitívne definitný. Taktiež každý prvok $V \in \partial F(y_*)$ je pozitívne definitný.*

Dôkaz. [Qi a Sun (2006), Proposition 3.6]

□

Vďaka lemmatu 5 poznáme implicitné vyjadrenie prvkov $V_k \in \partial F(y_k)$, to je

$$V_k h = \mathrm{diag}(P(M_y \circ (P^\top H P))P^\top),\ P \in \mathcal{O}_{C(y_k)}.$$

a máme všetky potrebné informácie k vytvoreniu postupnosti $\{y_k\}_{k=0}^{\infty}$. Naviac, s využitím vety 6 vieme, že tieto prvky sú taktiež pozitívne definitné matice [Qi a Sun (2006), Proposition 5.4].

Ak by sme chceli matice V_k vypočítať explicitne, môžeme toho docieliť položením $h = e_i$, kde e_i je i-tý kanonický vektor pre $i = 1, \ldots, n$. To by bolo ale na výpočet veľmi drahé, len pre jedno h je cena $\mathcal{O}(n^3)$ operácií, teda pre výpočet celej matice V_k je potreba $\mathcal{O}(n^4)$ operácií.

2.1.4 Algoritmus

V tejto časti predstavíme algoritmus od Qi a Sun (2006). Pre danú symetrickú maticu $G \in \mathbb{R}^{n\times n}$ nájde tento algoritmus najbližšiu korelačnú maticu X ku G vo Frobeniovej norme. Algoritmus využíva Newtonovu metódu pre nájdenie riešenia duálnej úlohy. Algoritmus končí, ak hľadaná hodnota je menšia ako tolerancia *error_tol*.

Algoritmus 1.

Krok 0: Nastavme počiatočné hodnoty: $y_0 = e - \mathrm{diag}(G) \in \mathbb{R}^n$, $\eta \in (0{,}1)$, $\rho, \sigma \in (0, \frac{1}{2}]$ a $k := 0$.

Krok 1: Vypočítame $\nabla\theta(y_k)$. Ak je splnené $\|\nabla\theta(y_k)\| \leq \mathit{error\_tol}$, potom $X = (G + \mathrm{Diag}(y_k))_+$ a algoritmus skončí. Inak pokračujeme na krok 2.

Krok 2: Spočítame spektrálny rozklad $(G + \mathrm{Diag}(y_k))$ a spočítame maticu M_{y_k} ako je v lemmate 5.

Krok 3: Vezmeme $V_k \in \partial F(y_k)$ a metódou združených gradientov určíme nový smer $d_k := y_{k+1} - y_k$, v k-tom kroku ako riešenie

$$V_k d_k = -\nabla\theta(y_k) \tag{2.7}$$

tak, aby boli splnené nasledujúce podmienky

$$\|\nabla\theta(y_k) + V_k d_k\| \leq \eta_k \|\nabla\theta(y_k)\|,$$

$$-\frac{\nabla\theta(y_k)^\top}{\|d_k\|} \cdot \frac{d_k}{\|d_k\|} \geq \eta_k,$$

kde $\eta_k = \min\{\eta, \|\nabla\theta(y_k)\|\}$. Ak niektorá z týchto podmienok nemôže byť splnená, položme $d_k := -B_k^{-1}\nabla\theta(y_k)$ pre B_k ľubovoľnú symetrickú pozitívne definitnú maticu v $\mathcal{S}_+^n$.

Krok 4: Určíme primeranú dĺžku kroku α_k. Nájdeme najmenšie $m_k \in \mathbb{N}_0$, aby platilo

$$\theta(y_k + \rho^{m_k} d_k) - \theta(y_k) \leq \sigma \rho^{m_k} \nabla\theta(y_k)^\top d_k$$

(Armijo backtracking).

Krok 5: Položme $\alpha_k = \rho^{m_k}, y_{k+1} = y_k + \alpha_k d_k$ a zvýšime hodnotu k na $k+1$. Pokračujeme ďalej krokom 1.

Poznámka. Pre kvadratický rád konvergencie je potrebné, aby $\{\|B_k\|\}$ a $\{\|B_k^{-1}\|\}$ boli ohraničené. [Qi a Sun (2006), Theorem 5.3]. Podľa tohoto tvrdenia vieme, že postupnosť $\{y_k\}_{k=1}^\infty$ je ohraničená a $y_k \to y_*$ pre $k \to \infty$. Vieme, že $(.)_+$ je lipchitzovská, môžme teda pre $X_k = (G + \mathrm{Diag}(y_k))_+$ odvodiť nasledovné

$$\begin{aligned}
\|X_k - X_*\|_f &= \|(G + \mathrm{Diag}(y_k))_+ - (G + \mathrm{Diag}(y_*))_+\|_F \\
&\leq \|\mathrm{Diag}(y_k) - \mathrm{Diag}(y_*)\|_F \\
&= \|y_k - y_*\|_2.
\end{aligned}$$

Teda $X_k \to X_*$ pre $k \to \infty$.

2.2 W- vážená verzia

V tejto časti sa budeme zaoberať W- váženou verziou problému (2.1). Tento problém môžme zapísať do tvaru konvexnej optimalizačnej úlohy ako

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}\|G - X\|_W^2, \quad G \in S^n \text{ daná} \\ \text{s.t.} \quad & \operatorname{diag}(X) = e \quad \text{a} \quad X \in S_+^n, \end{aligned} \tag{2.8}$$

kde $W \in \mathcal{S}^n$ pozitívne definitná matica a pre ľubovoľnú $Y \in \mathcal{S}^n$ je

$$\|Y\|_W = \|W^{1/2} Y W^{1/2}\|_F.$$

Položme $\tilde{G} = W^{1/2} G W^{1/2}$ a $\tilde{X} = W^{1/2} X W^{1/2}$. Potom problém (2.8) prevedieme na problém podobného tvaru ako (2.1) a to

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}\|\tilde{G} - \tilde{X}\|^2, \quad \tilde{G} \in S^n \text{ daná} \\ \text{s.t.} \quad & \operatorname{diag}(W^{-1/2} \tilde{X} W^{-1/2}) = e \quad \text{a} \quad \tilde{X} \in S_+^n, \end{aligned} \tag{2.9}$$

Poznámka. V (2.9) by sme mali písať podmienku $W^{-1/2} \tilde{X} W^{-1/2} \in S_+^n$, ale pretože súčin pozitívne definitných matíc je pozitívne definítna matica, sú tieto podmienky ekvivalentné.

Definujme operátor $\operatorname{diag}_W : \mathcal{S}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ ako

$$\operatorname{diag}_W(X) = \operatorname{diag}(W^{-1/2} \tilde{X} W^{-1/2}).$$

Združený operátor $\operatorname{Diag}_W : \mathbb{R}^n \mapsto \mathcal{S}^n$ je potom daný

$$\begin{aligned} \langle \operatorname{Diag}_W(y), X \rangle &= \langle y, \operatorname{diag}_W(X) \rangle \\ &= \langle y, \operatorname{diag}(W^{-1/2} X W^{-1/2}) \rangle \\ &= \langle \operatorname{Diag}(y), W^{-1/2} X W^{-1/2} \rangle \\ &= \langle W^{-1/2} \operatorname{Diag}(y) W^{-1/2}, X \rangle. \end{aligned}$$

V tretej rovnosti sme využili, že operátor Diag je združeným operátorom k operátoru diag. Odtiaľ dostávame vyjadrenie združeného operátora

$$\operatorname{Diag}_W(y) = W^{-1/2} \operatorname{Diag}(y) W^{-1/2}$$

S tým, ako je tento problém daný a spolu s definíciami operátorov vidíme, že môžme paralelne odvodiť obdobné výsledky ako pre základnú verziu a tým použiť Newtonov algoritmus pre nájdenie riešenia. Teda dostávame, že pre W- váženú verziu je Newtonovm algoritmus taktiež konvergentný v kvadratickom ráde.

2.3 Predpodmienenie

Hlavnou myšlienkou predpodmienenia je transformovať systém $Ax = b$ na systém $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$ bez pridania viac operácií tak, aby sme vedeli niečo zistiť o matici $\hat{A}$.

Aby sme mohli použiť predpodmienenie na systém (2.7), potrebujeme vedieť, ako vyzerá matica V_k. Ako sme ale zmienili vyššie, maticu V_k nie je možné vyjadriť explicitne v rozumnom počte operácií. Teda nevieme nič o jej vlastných číslach. Napriek tomu môžeme vypočítať prvky na diagonále matice V_k a potom aplikovať Jakobiho predpodmienenú maticu (pre maticu A pozitívne definitnú to je $D = \mathrm{Diag}(\mathrm{diag}(A))$ a predpodmienená matica je potom $D^{-1/2}AD^{-1/2}$), ktorá bude tvaru $D_k = \mathrm{Diag}(\mathrm{diag}(V_k))$.

Pre výpočet diagonálnych prvkov matice V_k položme $h = e_i$, $H = e_i e_i^\top$, $P = [p_1, \ldots, p_n]$. Potom dostávame

$$\begin{aligned} v_{ii} &= e_i^\top P(M_y \circ P^\top HP)P^\top e_i = p_i^\top (M_y \circ p_i p_i^\top)p_i \\ &= p_i \mathrm{Diag}(p_i) M_y \mathrm{Diag}(p_i) p_i = q_i^\top M_y q_i, \end{aligned}$$

kde $q_i = p_i \circ p_i$. Teda diagonálne prvky sú spočítané nasledovne:

$$\begin{aligned} Q &= [q_1, \ldots, q_n] = P \circ P \\ W &= [w_1, \ldots, w_n] = M_y Q \\ v_{ii} &= q_i^\top w_i, \quad i = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

Ako vidíme, najviac operácií predvedieme pri počítaní matice W, pretože sa jedná o súčin dvoch matíc. Stále ale máme rádovo menej operácií, akoby sme mali počítať všetky prvky matice V_k.

2.3.1 Modifikovaný algoritmus

V tejto sekcii uvedieme algoritmus, ktorý je modifikáciou algoritmu v časti (2.1.4). Tento algoritmus využíva vylepšenia, ktoré sú popísané v [Borsdorf a Higham (2010) , kapitola 3].

Jedným z dôvodov, prečo zavádzame algoritmus 2 je drobný problém algoritmu 1, ktorý nám nedá maticu s jednotkovou diagonálou, pretože podmienka $\mathrm{Diag}(X) = e$ nie je explicitne vynútená. Teda pre $\nabla\theta(y) \neq 0$ vidíme z (2.3) a (2.4), že matica nemôže mať jednotkovú diagonálu. Riešením tohto problému by mohla byť zmena diagonálnych prvkov na jednotkové, no to by ale mohlo zničiť definítnosť matice. Ukážeme prístup, vďaka ktorému neporušíme definítnosť matice a dostaneme jednotkové prvky na diagonále.

Maticu $\tilde{X}$ z poslednej iterácie nahradíme maticou

$$X = D^{-1/2}\tilde{X}D^{-1/2}, \quad D = \mathrm{Diag}(\mathrm{diag}(\tilde{X})),$$

ktorá už bude mať jednotkovú diagonálu. Keďže je táto transformácia kongruenciou, zachováva definítnosť matice. Zároveň sa ale môže zväčšiť vzdialenosť od matice G. V nasledujúcom lemmate určíme hornú medzu na odhad vzdialenosti po užití tejto transformácie.

Lemma 7. *Nech $X \in S_+^n$ je výstupom algoritmu 1 a $D = Diag(diag(X))$, potom*

$$\|G - D^{-1/2}XD^{-1/2}\|_F \leq \|G - X\|_F + \frac{tol}{1 - tol}\|X\|_F$$

Dôkaz. *[Borsdorf a Higham (2010), Lemma 3.2.]*

□

Algoritmus 2.

Krok 0: Nastavíme počiatočné hodnoty $y_0 = e - \operatorname{diag}(G) \in \mathbb{R}^n$, $\eta = 0{,}5$, $\mu \in (0{,}1)$, $\rho, \sigma \in (0, 1/2]$ a $k = 0$.

Krok 1: Vypočítame $\nabla\theta(y_k)$. Ak je splnené $\|\nabla\theta(y_k)\| \leq \mathit{error\_tol}$, potom položme $X = D^{-1/2}\tilde{X}D^{-1/2}$, kde $\tilde{X} = (G + \operatorname{Diag}(y_k))_+$ a $D = \operatorname{Diag}(\operatorname{diag}(\tilde{X}))$, a algoritmus skončí. Inak pokračujeme na krok 2.

Krok 2: Spočítame spektrálny rozklad $(G + \operatorname{Diag}(y_k))$, maticu M_{y_k} a Jakobiho predpodmienenú maticu $D_k = \operatorname{Diag}(\operatorname{diag}(V_k))$.

Krok 3: Určíme nový smer $d_k := y_{k+1} - y_k$ ako riešenie predpodmieneného systému

$$D_k^{-1/2} V_k D_k^{-1/2} \cdot D_k^{1/2} d_k = -D_k^{-1/2} \nabla\theta(y_k) \tag{2.10}$$

tak, aby boli splnené nasledujúce podmienky

$$\|\nabla\theta(y_k) + V_k d_k\| \leq \eta_k \|\nabla\theta(y_k)\| \quad \text{pre } \eta_k = \min\{\eta, \|\nabla\theta(y_k)\|\},$$

$$-\frac{\nabla\theta(y_k)^\top}{\|d_k\|} \cdot \frac{d_k}{\|d_k\|} \geq \eta_k.$$

Ak nemôže byť splnená niektorá z podmienok, potom položme $d_k = -\nabla\theta(y_k)$.

Krok 4: Otestujeme, či môžme aplikovať Armijo backtracking. Ak sú funkčné hodnoty $\theta(y_k + \rho^{m_k} d_k)$ a $\theta(y_k)$ „skoro rovné“, tak položme $\alpha_k = 1$. Ak naviac platí

$$\frac{\|\nabla\theta(y_k + \alpha_k d_k)\|}{\|\nabla\theta(y_k)\|} \leq 1 - \mu,$$

tak pokračujme na krok 6, inak položme $d_k = -\nabla\theta(y_k)$. Ak $\theta(y_k + \rho^{m_k} d_k)$ a $\theta(y_k)$ nie sú „skoro rovné“, pokračujme na krok 5.

Krok 5: (Armijo backtracking) Pre $m_k = 0 : \infty$
Ak $\theta(y_k + \rho^{m_k} d_k) \leq \theta(y_k) + \sigma\rho^{m_k} \nabla\theta^\top d_k$ potom položme $\alpha_k = \rho^{m_k}$ a pokračujeme na krok 6.
Po každom navýšení m_k otestujeme, či môžeme znovu aplikovať Armijo backtracking. Testujeme rovnako ako v kroku 4. Ak test prejde, pokračujeme v navyšovaní m_k. Ak nie, pokračujeme na krok 6. Ak je Armijo backtracking úspešný, položme $\alpha_k = \rho^{m_k}$.

Krok 6: Položme $y_{k+1} = y_k + \alpha_k d_k$ a zvýšme hodnotu k na $k + 1$. Prejdime na krok 1.

Poznámka. Aby sme mohli o dvoch prvkoch a,b povedať, že sú „skoro rovné“, musí platiť $|a - b| < \gamma\varepsilon(1 + |a| + |b|)$.

2.4 H- vážená verzia

H-váženým problémom nájdenia najbližšej korelačnej matice rozumieme optimalizačný problém

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2}\|H \circ (G - X)\|_F^2, \quad G \in S^n \text{ daná} \\ \text{s.t.} \quad & \operatorname{diag}(X) = e \quad \text{a} \quad X \in S_+^n \,, \end{aligned} \tag{2.11}$$

kde H je symetrická matica s nezápornými prvkami. Oproti W- váženej verzii sa líši tým, že každému prvku môžme navoliť vlastnú váhu. Ak by sme volili $H = E$, dostali by sme rovnaký problém, ako keby sme pri W- váženej verzii volili $W = I$. Tento problém bol prvýkrát predstavený v [Higham (2002)], kde riešenie bolo odvodené na základe projekčných metód. My sa pozrieme na odvodenie pomocou duálneho prístupu.

Pre základnú verziu sa duálna úloha (2.2) odvodila na základe Lagrangeovej funkcie, ktorá má následujúci tvar:

$$l(X,y) := \frac{1}{2}\|G - X\|_F^2 + y^\top (e - \operatorname{diag}(X)),$$

kde $X \in S_+^n$, $y \in \mathbb{R}^n$. Podľa [Qi a Sun (2011)] sa tento prístup nedá aplikovať na problém (2.11) kvôli nedostatočnej znalosti spočítania projekcie pod H- váhou. Môžme si teda klásť otázku, či existuje nejaký prístup v podobnej forme pre H-váženú verziu. V [Qi a Sun (2011)] je opísaná teória, ktorá je založená na rozšírenom Lagrangeovom duálnom prístupe. V nasledujúcej časti sa tomuto prístupu budeme venovať.

2.4.1 Rozšírený Lagrangeov prístup

Nech $c > 0$ je konštanta. Rozšírena Lagrangeova funkcia pre problém (2.11) je tvaru

$$\begin{aligned} L_c(X, y, Z) : = & \frac{1}{2}\|H \circ (G - X)\|_F^2 + y^\top (e - \operatorname{diag}(X)) \\ & + \frac{c}{2}\|e - \operatorname{diag}(X)\|_F^2 + \frac{1}{2c}(\|(Z - cX)_+\|_F^2 - \|Z\|_F^2) \end{aligned}$$

pre $(X, y, Z) \in \mathcal{S}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathcal{S}^n$. Dá sa ukázať, že táto funkcia je konvexná. Lagrangiov duálny problém má potom nasledujúci tvar

$$\min_{y \in \mathbb{R}^n,\, Z \in \mathcal{S}^n} \left\{ v_c(y, Z) := -\min_{X \in \mathcal{S}^n} L_c(X,\, y,\, Z) \right\}. \tag{2.12}$$

Nahliadnime, že pre ľubovoľné $c_k > 0$ je funkcia $v_c(.)$ spojite diferencovateľná a jej gradient je rovný

$$\nabla v_c(y_k, Z_k) = \begin{pmatrix} -(e - \operatorname{diag}(X_{k+1})) \\ \frac{1}{c_k}(Z_k - (Z_k - c_k X_{k+1})_+) \end{pmatrix}.$$

Hlavnou úlohou rozšíreného Lagrangeovho prístupu je nájdenie riešenia neohraničeného problému

$$\min_{X \in \mathcal{S}^n} L_c(X, y, Z), \quad (y, Z) \in \mathbb{R}^n \times \mathcal{S}^n.$$

Hľadanie tohto riešenia vyzerá nasledovne: nech $c_0 > 0$ je dané a nech $(y_0,\, Z_0) \in \mathbb{R}^n \times \mathcal{S}^n$ sú počiatočné body. V k- tej iterácií určíme

$$X_{k+1} = \arg\ \min L_{c_k}(X,\, y_k,\, Z_k), \tag{2.13}$$

spočítame (y_{k+1}, Z_{k+1}) ako

$$\begin{aligned} y_{k+1} &:= y_k + c_k(e - \operatorname{diag}(X_{k+1})), \\ Z_{k+1} &:= (Z_k - c_k X_{k+1})_+ \end{aligned}$$

a navolíme hodnotu c_{k+1} ako $c_{k+1} = c_k$ alebo $c_{k+1} > c_k$.
Môžeme si všimnúť, že postupnosť $\{(y_k, Z_k)\}_{k=0}^{\infty}$ generovaná rozšírenou Lagrangeovou metódou je vlastne aplikácia metódy klesajúceho gradientu na (2.12) s dĺžkou krouku c_k a pre k-tu iteráciu platí

$$(y_{k+1}, Z_{k+1}) = (y_k, Z_k) - c_k \nabla v_{c_k}(y_k, Z_k).$$

Podľa [Qi a Sun (2011), časť 3.1.] môžeme rozšírenú Lagrangeovu metódu brať ako aproximáciu Newtonovej metódy pre rovnicu $v_{c_k}(y, Z) = 0$, pokiaľ je konštanta c_k dostatočne veľká, teda člen $-c_k \nabla v_{c_k}(y_k, Z_k)$ je vhodnou aproximáciou členu $-V_k^{-1} \nabla v_{c_k}(y_k, Z_k)$, kde $V_k \in \partial \nabla v_{c_k}(y_k, Z_k)$.

Otázkou ešte ostáva, ako vyriešiť problém (2.13). Ak by sme tento problém nevedeli riešiť, celá metóda by bola zbytočná. Ukážeme, že aplikácia Newtonovej metódy (2.5) na tento problém je riešením.
Zvoľme pevné $c > 0$, $(y, Z) \in \mathbb{R}^n \times \mathcal{S}^n$ a definujme funkciu

$$\Theta(X) := L_c(X, y, Z), \quad X \in \mathcal{S}^n.$$

Cieľom je použiť Newtonovu metódu pre problém

$$\min_{X \in \mathcal{S}^n} \Theta(X). \tag{2.14}$$

Keďže Θ je konvexná funkcia, môžme povedať, že riešenie (2.14) je ekvivalentné riešeniu rovnice

$$0 = \nabla\Theta(X) = Q \circ X - \operatorname{diag}(y + c(e - \operatorname{diag}(X))) - (Z - cX)_+ - Q \circ G \tag{2.15}$$

pre Q definované ako $Q = H \circ H$. Podľa [Qi a Sun (2011)] je $\nabla\Theta$ silno polohladká (odtiaľ dostávame, že je taktiež lipchitzovská) a podľa teórie v opísanej v časti (2.1.2) môžme použiť Newtonovu metódu pre riešenie (2.15), ktorá má tvar

$$X_{k+1} = X_k - V_k^{-1} \nabla\Theta(X_k), \tag{2.16}$$

kde $V_k \in \partial\nabla\Theta(X_k)$. Na to, aby Newtonova metóda fungovala, je potrebné, aby prvky $\partial\nabla\Theta(X_k)$ boli pozitívne definitné. To môžeme nájsť v [Qi a Sun (2011), časť 3.2.]. Vďaka aplikácii Newtonovej metódy dostávame, že tento prístup má taktiež kvadratický rád konvergencie.

3. Praktická časť

V tejto kapitole sa pozrieme na aplikácie algoritmov 1 a 2 na jednoduchom príklade. Taktiež si tieto dva algoritmi porovnáme na viacerých testovacích datach.
Všetky numerické výpočty sú predvedené v MATLABe vo verzii 8.5.0.197613 (R2015a) na Intel(R) Pentium(R) CPU B960 2.2GHz.

Príklad. A je náhodne generovaná korelačná matica z `gallery('randcorr',n)` v MATLABe. B je náhodná symetrická matica s prvkami $B_{i,j} \in [-1,1]$. Položme $G = A + B$ ako našu maticu.

Maticu, ktorú použijeme v tomto príklade vygenerujeme nasledujúcim spôsobom:

```
rng(2017);
A=-1+2*rand(5);
A=(A+A')/2;
rng(2017);
B=gallery('randcorr',5);
G=A+B.
```

Podľa tohto postupu dostávame maticu

$$G = \begin{pmatrix} 0.0419 & 0.9961 & -0.5650 & -0.6734 & 0.4803 \\ 0.9961 & 0.2813 & -0.7734 & 0.2925 & -0.5867 \\ -0.5650 & -0.7734 & 0.7746 & -0.2994 & -0.0773 \\ -0.6734 & 0.2954 & -0.2994 & 0.1523 & -0.6198 \\ 0.4803 & -0.5867 & -0.0773 & -0.6198 & 0.8753 \end{pmatrix},$$

ktorá je symetrická a teda môže byť vstupným parametrom. Postupne na ňu aplikujeme základný a potom modifikovaný algoritmus. Začneme základným algoritmom. Nastavíme si počiatočné hodnoty $y_0 = e - \mathrm{diag}(G)$, $\eta = 10^{-6}$, $\sigma = 10^{-4}$, $\rho = \frac{1}{2}$. Toleranciu *error_tol* nastavíme na hodnotu 10^{-6}.

V prvom kroku algoritmu 1 spočítame $\nabla\theta(y_0)$ a jeho normu. Keďže $\|\nabla\theta(y_0)\| = 0.2909 > error\_tol$, pokračujeme ďalej na krok 2, pretože norma gradientu nie je menšia ako tolerancia.
V krorku 2 spočítame spektrálny rozklad $(G + \mathrm{Diag}(y_0))$, to je $(G + \mathrm{Diag}(y_0)) = P\mathrm{Diag}(\lambda)P^\top$ a maticu M_{y_0}. Máme

$$P = \begin{pmatrix} 0.6311 & -0.2959 & -0.2015 & -0.3574 & 0.5881 \\ -0.6403 & -0.2365 & -0.2822 & 0.2527 & 0.6250 \\ -0.0604 & -0.5800 & -0.6190 & -0.1203 & -0.5122 \\ 0.2526 & -0.5859 & 0.4248 & 0.6415 & -0.0305 \\ -0.3526 & -0.4206 & 0.5622 & -0.6184 & -0.0164 \end{pmatrix}, \quad \lambda = \begin{pmatrix} -0.4944 \\ 0.0379 \\ 0.7391 \\ 2.1452 \\ 2.5722 \end{pmatrix},$$

$$M_{y_0} = \begin{pmatrix} 0 & 0.0712 & 0.59920 & 0.8127 & 0.8388 \\ 0.0712 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.5992 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.8127 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.8388 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Pokračujeme ďalej v algoritme. Pomocou metódy združených gradientov nájdeme nový smer d_0 ako riešenie (2.7) tak, aby boli splnené dané podmienky. Ak aspoň jedna podmienka nebude splnená, voľme $d_0 = -\nabla\theta(y_0)$. Ďalej aplikujeme Armijo backtracking pre nájdenie primeranej dĺžky kroku α_0 a položíme $y_1 = y_0 + \alpha_0 d_0$. Vrátime sa na krok 1 a opakujeme, pokiaľ $\|\nabla\theta(y_k)\| < error\_tol$. Po niekoľkých iteráciách (k=3) sa dostávame k riešeniu duálneho problému y_*, ktoré je tvaru

$$y_* = (0.6294 \quad 0.3830 \quad 0.2036 \quad 0.7845 \quad 0.0324)$$

a riešením primárneho problému je matica

$$X_* = \begin{pmatrix} 1.0000 & 0.6745 & -0.5809 & -0.5433 & 0.3256 \\ 0.6745 & 1.0000 & -0.7368 & 0.1838 & -0.4152 \\ -0.5809 & -0.7368 & 1.0000 & -0.2900 & -0.0496 \\ -0.5433 & 0.1838 & -0.2900 & 1.0000 & 0.6659 \\ 0.3256 & -0.4152 & -0.0496 & -0.6659 & 1.0000 \end{pmatrix}.$$

Ako môžme vidieť, na diagonále nie sú prvky presne rovné jednej, teda matica X nepatrí do množiny prípustých riešení problému (2.1). Tento fakt sme si objasnili v časti (2.3.1).

Teraz na maticu G použijeme algoritmus 2. Až do druhého kroku robíme rovnaké úkony, ale naviac spočítame predpodmienenú maticu

$$D_0 = \begin{pmatrix} 0.5114 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.9434 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.9730 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.9316 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5565 \end{pmatrix}.$$

Táto matica je vlastne matica s diagonálnymi prvkami matice $V_0 \in \partial F(y_0)$. O tom, ako ich vypočítať sme si rozobrali v časti (2.3). Ďalej vypočítame nový smer d_0 ako riešenie predpodmieneného systému (2.10) pomocou metódy združených gradientov (táto metóda konverguje pomaly, ale na matice malých rozmerov je aplikovateľná. Pre matice väčších rozmerov sa môže riešenie (2.10) nájsť nejakou inou iteračnou metódou, napríklad metódou minimálnych reziduí). Ak riešenie nesplňuje dané podmienky, volíme $d_0 = -\nabla\theta(y_0)$. V ďalšom kroku testujeme následné použitie backtrackingu a hľadáme primeranú dĺžku kroku α_0. Položíme $y_1 = y_0 + \alpha_0 d_0$, vrátime sa na začiatok a opakujeme iterácie až pokiaľ nesplníme podmienku pre koniec algoritmu. V našom prípade algoritmus končí po k=3 iterácii a riešením primárneho problému je matica

$$\hat{X}_* = \begin{pmatrix} 1 & 0.6745 & -0.5809 & -0.5433 & 0.3256 \\ 0.6745 & 1 & -0.7368 & 0.1838 & -0.4152 \\ -0.5809 & -0.7368 & 1 & -0.2900 & -0.0496 \\ -0.5433 & 0.1838 & -0.2900 & 1 & 0.6659 \\ 0.3256 & -0.4152 & -0.0496 & -0.6659 & 1 \end{pmatrix}.$$

Táto matica je symetrická, má jednotkové prvky na diagonále a ak sa pozrieme na jej spektrálny rozklad, tak uvidíme, že vlastné čísla matice $\hat{X}_*$ sú nezáporné. Matica $\hat{X}_*$ je na základe vlastných čísel pozitívne semidefinitná a patrí do množiny prípustných riešení problému (2.1).
Vzdialenosť G od $\hat{X}_*$ je potom $\|G - \hat{X}_*\|_F = 1.6127$.

3.1 Porovnanie algoritmov

V tejto časti nahliadneme na efektivitu oboch algoritmov. Pozrieme sa, v akom časovom rozsahu sú schopné zvládnuť dané výpočty a koľko iterácií je potrebných k dosiahnutiu výsledku. Rozdielom medzi algoritmami je, že algoritmus 2 oproti algoritmu 1 využíva predpodmieňovanie.
Nasledujúce príklady budú určovať naše testovacie data:

Príklad 1. *A je náhodná symetrická matica s prvkami* $A_{i,j} \in [-\beta,\beta]$. *B je náhodne generovaná korelačná matica z* `gallery('randcorr',n)` *v MATLABe. Položme* $G = A + B$ *ako našu maticu. Budeme uvažovať* $\beta = 0.01, 0.1, 1, 10$ *a* $n = 100, 300, 500, 1000$.

Príklad 2. *G je náhodne generovaná matica* $n \times n$ *s* $G_{ij} \in [-1,1]$ *a* $G_{ii} = 1$, $i,j = 1,\ldots,n$. *Budeme uvažovať* $n = 500, 1000, 1500, 2000$.

Ako počiatočné hodnoty voľme $y_0 = e - \mathrm{diag}(G)$, $\eta = 10^{-5}$, $\rho = \frac{1}{2}$, $\sigma = 10^{-4}$ a $error\_tol = 10^{-6}$.

Výsledky v nasledujúcich tabuľkách zachycujú nasledujúce:

- čas- ubehnutý čas od spustenia algoritmu až po koniec v sekundách
- iterácie- počet iterácii, ktoré algoritmus predviedol k dosiahnutiu výsledku
- norma- $\|G - X\|_F$

	Algoritmus 1 základný			Algoritmus 2 modifikovaný		
	Čas	**Iterácie**	**Norma**	**Čas**	**Iterácie**	**Norma**
n=50						
β=0.01	0.0087	0	0.0415	0.0057	0	0.0415
β=0.1	0.0154	2	0.4316	0.0130	2	0.4316
β=1	0.0229	4	13.5315	0.0276	4	13.5315
β=10	0.0376	6	194.4544	0.0638	6	194.4544
n=100						
β=0.01	0.0136	0	0.0569	0.0139	0	0.0569
β=0.1	0.0286	2	0.7431	0.0296	2	0.7431
β=1	0.0787	4	29.7126	0.0552	4	29.7126
β=10	0.0801	6	392.5292	0.1258	6	392.5292
n=500						
β=0.01	0.3979	1	0.1333	0.4677	1	0.1333
β=0.1	1.0711	3	6.4591	1,2278	3	6.4591
β=1	2.0071	5	174.4569	2.6794	5	174.4569
β=10	3.4756	7	2e+03	5.1330	7	2e+03
n=1000						
β=0.01	2.3448	1	0.2097	2.8403	1	0.2097
β=0.1	6.5717	3	17.1057	7.9539	3	17.1057
β=1	13.0423	5	363.6777	15.5986	5	363.6777
β=10	21.4273	7	4e+03	33.2705	7	4e+03

Tabuľka 3.1: Porovnanie základného a modifikovaného algoritmu na Príklade 1

	Algoritmus 1 základný			Algoritmus 2 modifikovaný		
	Čas	**Iterácie**	**Norma**	**Čas**	**Iterácie**	**Norma**
n=50	0.0323	4	12.5716	0.0241	4	12.5716
n=100	0.0448	4	28.8610	0.0571	4	28.8610
n=500	1.9868	5	173.5924	2.4205	5	173.5924
n=1000	13.5022	5	362.8017	15.5378	5	362.8017

Tabuľka 3.2: Porovnanie základného a modifikovaného algoritmu na Príklade 2

Z výsledkov uvedených v tabuľkách môžeme vidieť, že počet iterácií pre dosiahnutie výsledku je rovnaký. Taktiež norma $\|G-X\|_F$ ostáva pri obidvoch algoritmoch nemenná. Jediné, v čom sa algoritmi líšia, je čas predvedenia algoritmu. Ak sa pozrieme do tabuľky 3.1 a tabuľky 3.2, vidíme, že pre malé rozmery matíc sa čas líši v stotinách sekúnd. Ak sa však pozrieme na matice rozmerovo väčšie, vidíme, že sa časy líšia v desatinách až jednotkách sekúnd. Pri použití predpodmienenia by mala metóda konvergovať rýchlejšie, čím sa znižuje aj celkový čas, ktorý algoritmus vyžaduje. V našom prípade to tak ale neplatí. Môžme usúdiť, že to, ako dobre predpodmienenie funguje záleží od toho, ako vyzerá matica G na vstupe.

Problémom môže byť taktiež výber iteračnej metódy na riešenie sústavy (2.7) a (2.10). My sme použili metódu združených gradientov, o ktorej je známe, že pre matice veľkých rozmerov konverguje pomaly, čím sa predlžuje čas, ktorý algoritmus potrebuje.

Nahliadneme na simuláciu, ktorá sa nachádza v [Borsdorf (2007), strana 85]. Porovnáva sa tu náš algoritmus 1 s modifikovaným algoritmom, ktorý využíva metódu minimálych reziduí. Ako môžme vidieť, tuto je modifikovaný algoritmus vo väčšine prípadov až 1.5-krát a viac rýchlejší ako základný algoritmus. To nám teda poukazuje na väčšiu efektivitu modifikovaného algoritmu voči základnému.

Záver

Táto bakalárska práca sa zaoberala problémom najbližšej korelačnej matice. Po sformulovaní teórie k tomuto problému, ktorá čerpala hlavne z [Qi a Sun (2006)] a [Borsdorf (2007)], sme nazreli na proces hľadania riešenia a aplikovali sme ho na náš konkrétny problém. Na základe tejto teórie sme ďalej odvodili teóriu pre W a H- váženú verziu nášho problému.

Sformulovali sme algoritmus, ktorý nájde riešenie duálneho problému. Ukázalo sa však, že výstupom tohto algoritmu je matica, ktorá nespadá do množiny prípustných riešení, pretože na diagonále nemá jednotkové prvky. Preto sme tento algoritmus modifikovali a explicitne sme vynútili jednotkové prvky na diagonále.

Nakoniec sme na jednoduchom príklade demonštrovali základný aj modfikovaný algoritmus. Na rôznych testovacích datach sme porovnali oba algoritmi, kde pozorovanými faktormi boli čas prevedenia algoritmu a počet iterácií, ktoré viedli k výsledku. Výsledky týchto simulácii sme zhrnuli a vyhodnotili.

Zoznam použitej literatúry

Borsdorf, R. (2007). A Newton algorithm for the nearest correlation matrix. School of Mathematics, The University of Manchester.

Borsdorf, R. a Higham, N. (2010). A preconditioned Newton algorithm for the nearest correlation matric. *IMA Journal of Numerical Analysis*, **30**, 94–107.

Higham, N. J. (2002). Computing the nearest correlation matrix—a problem from finance. *IMA J Numer Anal*, **22**(1), 329–343.

Malick, J. (2004). A dual approach to semidefinite least-squares problems. *SIAM J. MATRIX ANAL. APPL*, **26**, 272–284.

Qi, H. a Sun, D. (2006). A quadratically convergent Newton method for computing the nearest correlation matrix. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, **28**(2), 360–385.

Qi, H. a Sun, D. (2011). An augmented Lagrangian dual approach for the H-weighted nearest correlation matrix problem. *IMA Journal of Numerical Analysis*, **31**, 491–511.

Qi, L. a Sun, J. (1993). A nonsmooth version of Newton's method. *Mathematical Programming*, **58**, 353–367.

Zoznam tabuliek