Posudek diplomové práce

Jan Dvořák
Vlastnosti a konstrukce core problému v úlohách fitování dat s násobným pozorováním

Vypracoval: doc. Ing. M. Plešinger, Ph.D.
Katedra matematiky a didaktiky matematiky, Technická univerzita v Liberci

Práce se zabývá řešením lineárních aproximačních úloh $AX \approx B$ metodou úplných nejmenších čtverců (TLS). Speciálně se autor zaměřuje na úlohu s maticovou pravou stranou B. Průběžně je však čtenář seznamován případně výklad motivován odpovídající úlohou s vektorovou stranou. V první kapitole je čtenář seznámen s řešitelností TLS úlohy, a tzv. klasickým TLS algoritmem, který vychází z prací Goluba, Van Loana a Van Huffel. Ve druhé kapitole je čenář obeznámen s ortogonální redukcí úlohy na tzv. core problém, ve třetí pak s jeho iterační konstrukcí. Práce je pak uzavřena čtvrtou kapitolou s numerickými experimenty.

Práce po formální stránce obsahuje některé drobnosti (překlepy, chyby ve shodě podmětu s přísudkem, ne zcela jednotné značení, atp.), které celkové prezentaci trochu škodí. Faktických chyb však obsahuje naprosté minimum. Konkrétně bych upozornil na nepřesnost na str. 11 (2. řádek nad vzorcem (2.2)), kde se píše: „matice A_{22} má alespoň jeden řádek a jeden sloupec“. Předpokládám, že tato věta je motivována snahou realizovat při hledání core problému *redukci* úlohy, tedy ostře zmenšit její rozměry. Pokud však původní úloha (2.1) bude již sama o sobě core problémem (např. $A := A_{11}$, $B := B_1$), zmenšit nepůjde a matice A_{22} bude formálně obsahovat nula řádků a nula sloupců (mohou nastat i situace, kdy má A_{22} nulový jen jeden z obou rozměrů).

Předně bych rád vyzdvyhnul, že se autor dobře zorientoval v ne příliš přehledném tématu. První tři kapitoly v podstatě rekapitulují již známé výsledky, poslední kapitola přináší autorovy vlastní výsledky. Autor implementoval několik skriptů realizujících klasický TLS algoritmus, blokovou Golubovu–Kahanovu bidiagonalizaci (GKB) a nástroj pro generování úloh různých vlastností, resp. s různě velkým core problémem. Následně pak prováděl experimenty sledující ztrátu ortogonality v blokové GKB, schopnost identifikovat tzv. deflaci v core problému navzdory zaokrouhlovacím chybám, případně porovnávat řešení získané přímo a prostřednictvím core redukce. Podobné experimenty budou nutnou součástí analýzy chování core redukce a jejího vlivu na řešení TLS úlohy v aritmetice s konečnou přesností. Přínosem jsou jak experimenty samotné, tak vyvinuté skripty. **Práce splňuje obvyklé požadavky, proto ji doporučuji k obhajobě.**

K práci mám několik poznámek:

- Podobné experimenty ovšem s úlohou s jednou pravou stranou, kde fakticky dojde k jediné deflaci zastavující GKB a vyjevující core problém, naznačují, že velký vliv na identifikaci deflace má vyvážení normy matice a normy pravé strany, norem bloků A_{11} a A_{22} v core redukci atp. Je možné podobné věci ve Vámi navržených generátorech úloh nastavovat? V názvu práce je zmínka o „násobném pozorování“, což si překládám tak, že matice B může obsahovat i velmi mnoho sloupců — jednotlivých pozorování, často velmi podobných. To ve výsledku (po transformaci) může významně navýšit normu matice B_1.
- V numerických experimentech se snažíte identifikovat deflaci měřením normy rozdílu příslušných matic. V některých případech přitom konstatujete, že se deflaci identifikovat nepodařilo, nepozoruteje však přitom žádné zpoždění. Při deflacích dochází „uzavírání“ invariantních podprostorů v (blokovém) Krylovově prostoru, daných nějakými kombinacemi startovacích vektorů. Tyto prostory spolu ale různě interagují. Nemyslím si, že by ke spoždění mělo docházet „blokovým způsobem“ — tedy k posunutí o blokovou iteraci, tedy způsobem, jakým se deflace snažíte identifikovat (pokud jsem to správně pochopil). Deflace se, domnívám se, může posouvat postupně. Ve Vámi citovaném článku [10] je pro identifikaci core problému studována pásová varianta GKB namísto blokové. Matematicky jsou oba algoritmy ekvivalentní, rozdíl je však v tom, že v pásové variantě jsou sloupce výsledné matice konstruovány postupně. Možná by při identifikaci deflace bylo užitečné, dívat se na celou úlohu po sloupcích.

V Liberci, 16. června 2021,
Martin Plešinger