**Oponentský posudek na habilitační práci RNDr. Ivany Pultarové, Ph.D.:**

# Iterační agregační–desagregační metody pro stochastické matice

V předkládané práci autorka shrnuje konvergenční vlastnosti iteračních agregačních–desagregačních (IAD) metod. Cílem je najít obecně platné podmínky konvergence těchto metod zejména pro numerický výpočet vektoru stacionárního rozdělení pravděpodobnosti obecně nesymetrických stochastických matic.

Na iterační agregační–desagregační metody lze pohlížet jako na maticové iterační metody předpodmíněné pomocí řešení vhodných úloh menších rozměrů, tedy jako na víceúrovňové metody nebo na metody typu multigrid.

Konečný diskrétní Markovův řetězec je náhodný proces s diskrétní množinou stavů a s diskrétními hodnotami času. Pravděpodobnost, že v čase $t_k$ bude proces ve stavu $i$, závisí pouze na stavu, ve kterém se proces nachází v čase $t_{k-1}$. Sloupcově stochastická matice $B$ typu $N \times N$ reprezentuje konečný diskrétní Markovův řetězec s N stavy (indexy sloupců a řádků odpovídají stavům). Hodnota prvku $[B]_{ij}$ představuje pravděpodobnost přechodu ze stavu $j$ do stavu $i$ během libovolného časového úseku $(t_k,\, t_{k+1})$.

Úlohu lze formulovat takto: hledáme vektor stacionárního rozdělení pravděpodobnosti ireducibilní stochastické matice $B$, neboli příslušného konečného diskrétního Markovova řetězce, tedy vektor $\hat{x}$, pro který

$$B\hat{x} = \hat{x} \quad \text{a} \quad e^{\mathrm{T}}\hat{x} = 1\,.$$

Podle Perronovy-Frobeniovy věty existuje právě jeden Perronův vektor $\hat{x}$ matice $B$ a tento vektor je kladný. Není-li stochastická matice $B$ ireducibilní, není jednoznačnost vektoru $\hat{x}$ zaručena.

Označme $L$ zvolený počet úrovní pro víceúrovňovou IAD metodu. Původní úloha odpovídá úrovni 1, nejhrubší uloha (o nejmenším rozměru) odpovídá úrovni $L$. V každé úrovni kromě nejhrubší zvolme skupiny stavů a předpokládejme, že v každé úrovni jsou stavy rozděleny do tzv. agregačních skupin (agregátů) tak, že každý agregát obsahuje pouze souvisle očíslované stavy. Zobrazení mezi vektory sousedních úrovní reprezentují matice redukce (agregace) a matice rozšíření (desagregace).

V $L-$úrovňové IAD metodě se v každé z úrovní $m = 1, 2, \ldots, L-1$ provede $\mu_m$ tzv. základních iterací (hladicích kroků) maticové iterační metody před redukcí úlohy na další úroveň $m+1$ a $\nu_m$ základních iterací po návratu do úrovně $m$. Úloha v úrovni $L$ se řeší přesně. Autorka uvádí algoritmus víceúrovňové IAD metody včetně různých variant, které dostaneme v závislosti na aplikované blokově iterační metodě.

V závěru Kapitoly 2 najdeme podrobný přehled prací, ve kterých je IAD metoda popisována jako určité zobecnění metod algebraického multigridu. Autorka uvádí např. souvislost mezi víceúrovňovými metodami pro řešení úloh se symetrickými maticemi a metodami pro stochastické matice, konkrétně algebraické víceúrovňové iterační metody (AMLI).

Teorie obsažená v předkládané práci má velmi zajímavé praktické aplikace (modelování elektronických komunikačních sítí, úlohy teorie obsluhy, aplikace v ekonomii, v chemii, molekulární biologii a genetice, konkrétně v genovém zpracování signálu, atd.). Za nejzajímavější považuji příklad internetových vyhledávačů, které mohou používat pro seřazení nalezených webovských stránek tzv. vektor PageRank (vektor stacionárního rozdělení pravděpodobnosti jisté stochastické matice) jehož prostřednictvím se hodnotí významnost odkazů.

Stěžejní částí předkládané práce je Kapitola 3. Autorka se v této kapitole zabývá lokální i globální konvergencí víceúrovňových IAD metod.

Pro téměř zcela rozdělitelné (NCD) matice lze v literatuře najít postačující podmínky pro globální konvergenci IAD metod. Autorka poznamenává, že v praxi je pro velké matice, např. pro matici internetových odkazů pro výpočet vektoru PageRank, prakticky nemožné detekovat strukturu NCD a ověřit uvedené postačující podmínky.

Pro obecné stochastické matice a libovolnou volbu agregačních skupin lze dokázat lokální konvergenci pro určité typy IAD metod. Pro dvouúrovňovou IAD metodu lze dokázat globální konvergenci např. pro speciální volbu agregátů s jedním krokem mocninné metody jako základní iterací.

Některé vlastnosti stochastických matic vedou k urychlení konvergence IAD metod. Například pro spojovatelnou matici dává dvouúrovňová IAD metoda s počátečním přiblížením $x^0 = (1, \ldots, 1)^{\mathrm{T}}$ po prvním cyklu přesné řešení. Konvergenci IAD metod příznivě ovlivňuje také vhodné přerovnání matice a vhodná volba agregačních skupin. Naopak nevhodná volba může vést k divergenci. Autorka uvádí, že je-li předepsán počet nebo velikost skupin, není známa obecně úspěšná strategie pro jejich volbu.

V závěru 3. kapitoly uvádí autorka přehledně vlastní přínos ke zkoumání lokální a globální konvergence víceúrovňových IAD metod. Uveďme například:

- Existuje primitivní stochastická matice typu $3 \times 3$, pro kterou IAD metoda osciluje pro skoro všechna počáteční přiblížení $x^0$ , viz odstavec 4.2.

- Pro základní iteraci odpovídající mocninné metodě a pro libovolnou volbu skupin byla odvozena nutná a postačující podmínka pro lokální konvergenci IAD metody, viz odstavec 4.3.

- O lokální konvergenci dvouúrovňové IAD metody s jedním krokem základní iterace odpovídající mocninné metodě lze rozhodnout na základě znalosti struktury nenulových prvků stochastické matice a znalosti volby agregátů. Obecná souvislost mezi počtem kroků základní iterace a konvergencí IAD metody není známa, viz. odstavec 4.4.

- Konvergenci IAD metod pro výpočet Perronova vektoru velké řídké ireducibilní stochastické matice lze zlepšit vhodným přerovnáním matice a vhodným výběrem základní iterace, viz. odstavec 4.6.

- Pro stochastické matice, které nejsou NCD ani symetrické nemusí zvýšení počtu kroků základní iterace znamenat zlepšení konvergence IAD metody, naopak může vést k divergenci, a to i v lokálním smyslu, viz. odstavce 4.4 a 4.5.

- Je-li stochastická matice $B$ symetrická nebo je-li $B = DUD^{-1}$, kde $D$ je nezáporná, diagonálná a $U$ je nezáporná, symetrická, a plati-li $TB = BT$, je dvouúrovňová IAD metoda s $T = B$, s libovolným počtem kroků základní iterace a s libovolnou volbou skupin lokálně konvergentní, viz. odstavec 4.7.

- Za vynikající výsledek považuji odvození formule pro šíření chyby pro víceúrovňové IAD metody s libovolným počtem úrovní a hladicích kroků. Pomocí této formule lze dokázat některé konvergenční vlastnosti IAD metod, je-li matice $B$ nesymetrická, viz.odstavec 4.9.

Práce svědčí o rozsáhlých znalostech dr. Pultarové především v oblasti iteračních agregačních–desagregačních metod pro stochastické matice, ale také v oblasti obecných víceúrovňových metod a metod typu multigrid. Autorka uvádí původní výsledky a techniky, které umožňují urychlit konvergenci IAD metod. Výsledky najdou své uplatnění např. v teoretické numerické matematice, v paralelním programování, v teorii diskrétních Markovových řetězců, ale víceúrovňové metody se také stále častěji uplatňují v nejrůznějších inženýrských aplikacích. Výsledky byly publikovány v renomovaných impaktovaných matematických časopisech, viz. Kapitola 4.

Předkládaná práce má vynikající úroveň, doporučuji ji uznat jako práci habilitační.

V Praze 29.8.2012 Doc. RNDr. Drahoslava Janovská, CSc.

Otázky pro dr. Pultarovou:

Z práce je zřejmé, že volba agregačních skupin je jednou z klíčových otázek pro konvergenci IAD metod pro stochastickou matici. Mohla byste, prosím, stručně doporučit, jak postupovat při jejich volbě?

Důležitou roli hraje také přerovnání matice. Zaujal mě zejména Tarjanův algoritmus, který umožňuje zmenšit šířku pásu velké pásové matice. Máte s aplikací tohoto algoritmu nějaké praktické zkušenosti, a to nejen pro IAD metody?