

Über nichtnegative Matrixfaktorisierungen und geometrische Algorithmen zur Approximation ihrer Lösungsmengen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Universität Rostock

vorgelegt von

Annekathrin Jürß, geb. am 25. Januar 1990 in Kühlungsborn

aus Rostock

Rostock, 10. März 2017

Gutachter:

1. Prof. Dr. Klaus Neymeyr,
Institut für Mathematik, Universität Rostock
2. Prof. Dr. Jens Starke,
Institut für Mathematik, Universität Rostock

Datum der Einreichung: 10. März 2017

Datum der Verteidigung: 10. April 2017

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Einführung in die Theorie nichtnegativer Matrixfaktorisierungen	4
2.1	Die Spektraltheorie nichtnegativer Matrizen	4
2.2	Die nichtnegative Matrixfaktorisierung	6
2.3	Anwendungsbeispiele und ein Modellproblem	9
3	Geometrische Interpretation der nichtnegativen Matrixfaktorisierung	12
3.1	Die Kegeldarstellung nichtnegativer Matrixfaktorisierungen	12
3.2	Niedrigdimensionale Darstellung von nichtnegativen Rangfaktorisierungen .	14
3.3	Verallgemeinerung des geometrischen Zugangs für gestörte Daten	25
3.4	Fazit	31
4	Geometrische Konstruktion der Menge zulässiger Lösungen für Rang-3-Matrizen	33
4.1	Konstruktion der Polygone INNPOL und FIRPOL	33
4.2	Konstruktion der Menge der zulässigen \mathcal{M}	34
4.3	Konstruktion der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$	40
4.4	Numerische Beispiele	51
4.5	Fazit	54
5	Optimierungsverfahren zur Approximation der Menge zulässiger Lösungen	56
5.1	Zielfunktionen der Optimierungsaufgabe	56
5.2	Einige Verfahren zur Approximation der Menge zulässiger Lösungen	59
5.3	Fazit	64
6	Konstruktion der Menge zulässiger Lösungen für Rang-4-Matrizen	66
6.1	Die Existenz nichtnegativer Rangfaktorisierungen von Rang-4-Matrizen . .	66
6.2	Der Strahlenalgorithmus unter Verwendung geometrischer Eigenschaften . .	68
6.3	Ein numerisches Beispiel	78
6.4	Fazit	82
7	Die Topologie der Menge zulässiger Lösungen	83
7.1	Topologische Struktur der Menge zulässiger Lösungen von Rang-3-Matrizen	83
7.2	Topologische Struktur der Menge zulässiger Lösungen von Rang-4-Matrizen	89
7.3	Fazit	95
8	Zusammenfassung und Ausblick	96
8.1	Wesentliche Resultate dieser Arbeit	96
8.2	Ausblick	97

1 Einleitung

Seit dem Beginn des letzten Jahrhunderts hat sich die Theorie nichtnegativer Matrizen zu einem intensiv bearbeiteten Forschungsgebiet entwickelt. Zahlreiche Anwendungsmöglichkeiten motivierten die Untersuchungen nichtnegativer Matrizen und ihrer Faktorisierungen auch in Disziplinen außerhalb der Linearen Algebra. Als Beispiele können etwa die Bereiche der dynamischen Programmierung, der Physik, der Chemie, der Wirtschafts- und den Sozialwissenschaften sowie der Demographie genannt werden [17, 18, 46]. Obwohl sich die Anwendungen nichtnegativer Matrixfaktorisierungen in unterschiedlichen Bereichen inhaltlich stark voneinander unterscheiden können, basieren sie dennoch auf denselben mathematischen Methoden. Folglich können neue Resultate in einem der Anwendungsfelder ebenso Einfluss auf weitere Forschungsgebiete nehmen.

Die Ergebnisse zur Theorie nichtnegativer Matrizen und nichtnegativer Matrixfaktorisierungen wurden im Wesentlichen durch zwei Entwicklungen geprägt. Als erstes sind nach [46] die Resultate der Spektraltheorie nichtnegativer quadratischer Matrizen zu nennen, die auf Perron [47] und Frobenius [24] zurückgehen. Ausgehend von ihren Ergebnissen entwickelte sich die Theorie nichtnegativer Matrizen zu einem aktiven Forschungsfeld innerhalb der Linearen Algebra. Die Perron-Frobenius Theorie ist in der mathematischen Fachliteratur vielfach dargestellt, siehe zum Beispiel die Monographien von Bapat und Raghavan [6], Seneta [59] und Minc [46]. Als zweiter wesentlicher Einfluss ist die Entwicklung von Algorithmen zur Bestimmung von nichtnegativen Matrixfaktorisierungen im Bereich der *Faktoranalyse* zu nennen. Das Ziel der Faktoranalyse ist es, aus multivariaten Daten Aussagen über die ihnen zugrunde liegenden Prozesse zu gewinnen und, falls möglich, relevante Faktoren zu extrahieren [16, 44].

Viele Ergebnisse, die in dieser Arbeit vorgestellt werden, stehen ursprünglich im Zusammenhang mit einer Fragestellung innerhalb der Chemometrie. Aus spektroskopischen Messdaten, die im Verlauf einer chemischen Reaktion aufgenommen wurden, sollen die Konzentrationsverläufe der chemischen Komponenten sowie die Reinspektren ermittelt werden. Dies führt über das Gesetz von Lambert-Beer auf eine nichtnegative Matrixfaktorisierung [43]. Dabei stimmen die Ränge der Faktoren mit dem Rang der Ausgangsmatrix überein. Da zu einer gegebenen nichtnegativen Matrix D keine eindeutig bestimmte nichtnegative Faktorisierung existiert, soll die Menge aller möglichen Faktorisierungen untersucht werden. Die Reinspektren und Konzentrationsprofile können unter Zuhilfenahme weiterer Informationen über das chemische System aus der Lösungsmenge extrahiert werden [31, 52, 53].

Abgeleitet von der Problemstellung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung in der Chemometrie ergeben sich etwa die Fragen, wie die Menge aller möglichen Faktorisierungen zugänglich gemacht werden kann, und wie im Fall von gestörten Matrizen zu verfahren ist, für die keine nichtnegative Faktorisierung existiert. Anstelle aller möglichen Matrixfaktoren kann die Menge der möglichen Zeilen eines Faktors betrachtet werden. Durch die Einführung geeigneter Skalierungen ist es weiter möglich diese Menge niedrigdimensional darzustellen, was auf die sogenannte *Menge der zulässigen Lösungen* führt. In der Literatur wurden konstruktive geometrische Verfahren angewendet, um diese Menge zu bestimmen [13, 14, 41, 49]. Die diesen Methoden zugrunde liegenden Eigenschaften der Menge der zulässigen Lösungen werden in der vorliegenden Arbeit detailliert untersucht. Zudem erfolgt eine Verallgemeinerung der Ansätze für approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierungen, die betragskleine negative Einträge in den Faktoren erlauben. Dies ermöglicht

erstmals die Anwendung der geometrischen Verfahren zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen von gestörten Daten.

Die Menge der zulässigen Lösungen hängt insbesondere von dem Rang der Ausgangsmatrix ab. Für Matrizen vom Rang 2 wurde von Lawton und Sylvestre bereits in den 1970er Jahren ein Verfahren zur Berechnung der Menge der zulässigen Lösungen vorgestellt [41]. Borgen und Kowalski verallgemeinerten diese Methode und entwickelten einen geometrischen Algorithmus, der zur Berechnung der Lösungsmenge für Rang-3-Matrizen angewendet werden kann [14]. Eine Verallgemeinerung dieses Algorithmus für approximativ nichtnegative Faktorisierungen wird in dieser Arbeit entwickelt und analysiert. Weiter wird ein Verfahren zur numerischen Approximation der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen vom Rang 4 hergeleitet und detailliert untersucht.

Aufbau der Arbeit

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt aufgebaut. In Kapitel 2 wird eine Einführung in die Theorie nichtnegativer Matrixfaktorisierungen gegeben. Die zentralen Ergebnisse der Spektraltheorie nichtnegativer Matrizen werden kurz dargestellt. Weiter wird die Problemstellung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung erläutert und die Aufgabenstellung durch verschiedene Anwendungsmöglichkeiten motiviert.

Kapitel 3 beschäftigt sich mit der geometrischen Beschreibung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung. Ausgehend von einer Beschreibung der Faktorisierungen mittels Kegeln im positiven Orthanten wird die Menge aller nichtnegativen Faktorisierungen in Matrizen vollen Ranges beschrieben und in eine niedrigdimensionale Darstellung überführt. Dabei wird anstelle der Menge aller nichtnegativen Faktorisierung $D = CA$, die Menge möglicher Zeilen des Faktors A unter einer gegebenen Skalierung betrachtet. Diese Menge wird als die Menge zulässiger Lösungen bezeichnet (vergleiche Definition 3.14). Die geometrische Beschreibung der Menge der zulässigen Lösungen wird zudem für approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierungen erweitert, die im Fall von gestörten Daten angewendet werden können. Die approximativ nichtnegative Faktorisierung erlaubt betragskleine negative Einträge in den Faktoren C und A .

Kapitel 4 ist der (approximativ) nichtnegativen Faktorisierung von Rang-3-Matrizen in Faktoren vollen Ranges gewidmet. Es werden geometrische Verfahren zur Bestimmung der Menge der zulässigen Lösungen vorgestellt und für die approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierung erweitert. Der vorgeschlagene line-moving Algorithmus macht es erstmals möglich die Menge der zulässigen Lösungen für approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierungen geometrisch zu bestimmen. Numerische Beispiele zu Modell- und Messdaten ergänzen die Darstellung.

In Kapitel 5 werden einige Methoden vorgestellt, um die Menge der zulässigen Lösungen unter Verwendung eines Optimierungsansatzes zu approximieren. Es werden zwei Zielfunktionen beschrieben, die verwendet werden können, um zu entscheiden, ob Punkte zur Menge der zulässigen Lösungen gehören. Eine Zielfunktion wird ausgehend von der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung der Matrix D definiert. Die zweite Zielfunktion basiert auf geometrischen Eigenschaften der Menge der zulässigen Lösungen. Im Weiteren werden einige in der Literatur verwendete Algorithmen zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen vorgestellt.

Kapitel 6 ist der Approximation der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen vom Rang 4 gewidmet. Es wird eine modifizierte Variante des Strahlenalgorithmus [58] entwickelt, die Optimierungsmethoden und geometrische Konstruktionen verbindet, wodurch der klassische Strahlenalgorithmus beschleunigt wird. Die Ergebnisse des Algorithmus werden

für ein Modellproblem ausführlich diskutiert.

Die topologische Struktur der Menge der zulässigen Lösungen von Rang-3- und Rang-4-Matrizen wird in Kapitel 7 untersucht. Die Resultate dieses Kapitels erlauben eine kritische Betrachtung der numerischen Methoden zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen.

Die Arbeit schließt mit einer kurzen Zusammenfassung und einem Ausblick.

Notation

Zur erleichterten Lesbarkeit der Arbeit sind die zentralen Variablen und Notationen, die in den Kapiteln wiederholt auftreten, im Folgenden mit kurzen Erklärung und Verweisen zu den Definitionen aufgeführt.

$D \in \mathbb{R}^{k \times n}$	eine Matrix vom Rang s mit $D \geq -\varepsilon_D$ für $\varepsilon_D = 0$ oder kleines $\varepsilon_D \geq 0$, vergleiche Abschnitt 2.2.
$C \in \mathbb{R}^{k \times s}$	eine Matrix vom Rang s mit $SC \geq -\varepsilon_C$ für $\varepsilon_C = 0$ oder kleines $\varepsilon_C \geq 0$, linker Faktor in einer (approximativ) nichtnegativen Rangfaktorisierung von D , vergleiche Abschnitt 2.2.
$S \in \mathbb{R}^{k \times k}$	positive Diagonalmatrix zur Skalierung der Zeilen der Matrix C , vergleiche Definition 3.19.
$A \in \mathbb{R}^{s \times n}$	Matrix vom Rang s mit $A \geq -\varepsilon_A$ für $\varepsilon_A \geq \varepsilon_D$, rechter Faktor in einer (approximativ) nichtnegativen Faktorisierung von D , vergleiche Abschnitt 2.2.
$U\Sigma V^T$	abgeschnittene Singulärwertzerlegung von D vom Rang s , vergleiche Definition 2.11.
σ_i	i -ter Singulärwert von D ($1 \leq i \leq s$), vergleiche Satz 2.10.
$u_i \in \mathbb{R}^k$	i -ter linker Singulärvektor von D ($1 \leq i \leq s$), vergleiche Satz 2.10.
$v_i \in \mathbb{R}^n$	i -ter rechter Singulärvektor von D ($1 \leq i \leq s$), vergleiche Satz 2.10.
$T \in \mathbb{R}^{s \times s}$	Transformationsmatrix, vergleiche Bemerkung 2.13.
INNPOL	inneres Polytop, vergleiche Definition 3.12.
FIRPOL	äußeres Polytop, vergleiche die Definition 3.8 für die nichtnegative Matrixfaktorisierung und die Definition 3.20 für die approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierung.
$\varepsilon_C > 0$	Parameter, der negative Einträge in der skalierten Matrix SC nach unten beschränkt, vergleiche Definition 3.19.
$\varepsilon_A > 0$	Parameter, der negative Einträge in der Matrix A nach unten beschränkt, vergleiche Definition 3.19.
\mathcal{M}	Menge der zulässigen Lösungen (AFS), vergleiche Definition 3.14.
$\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$	verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen für approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierungen, vergleiche Definition 3.19.
w	Normalenvektor einer Hyperebene, in der die Menge der zulässigen Lösungen dargestellt wird, vergleiche Kapitel 3.2.1.
f_{NMF}	Zielfunktion der Optimierungsaufgabe, vergleiche Kapitel 5.1.1.
f_{geo}	geometrische Zielfunktion der Optimierungsaufgabe, vergleiche Kapitel 5.1.2.

Vektoren werden in dieser Arbeit stets als Spaltenvektoren verwendet. Der Eintrag in der i -ten Zeile und j -ten Spalte einer Matrix A sei $A(i, j)$. Mit $A(i, :)$ wird die i -te Zeile und mit $A(:, j)$ die j -te Spalte der Matrix A bezeichnet. Ungleichungen zwischen Matrizen oder Vektoren sind jeweils komponentenweise zu verstehen.

2 Einführung in die Theorie nichtnegativer Matrixfaktorisierungen

Im Folgenden wird eine kurze Einführung in die Theorie nichtnegativer Matrizen gegeben und die Aufgabenstellung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung erläutert. Der erste Abschnitt beschäftigt sich vorwiegend mit der Spektraltheorie quadratischer nichtnegativer Matrizen. Insbesondere wird der Satz von Perron und Frobenius herausgestellt, der grundlegend für weitere Betrachtungen in dieser Arbeit ist. Anschließend wird die Problemstellung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung eingeführt. Dabei wird vor allem auf die Nichteindeutigkeit der Faktorisierungsaufgabe und auf die Faktorisierung gestörter Matrizen eingegangen. Ein Modellproblem sowie einige Anwendungsbeispiele, die die Betrachtung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung motivieren, werden im letzten Abschnitt dieses Kapitels vorgestellt.

2.1 Die Spektraltheorie nichtnegativer Matrizen

Zunächst sollen einige zentrale Eigenschaften nichtnegativer quadratischer Matrizen $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ beleuchtet werden. Dabei wird insbesondere auf die Spektraltheorie eingegangen. Das zentrale Ergebnis dieser Theorie ist der Satz von Perron und Frobenius. Er besagt, dass nichtnegative, irreduzible Matrizen $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ einen positiven Eigenvektor zu einem positiven Eigenwert besitzen. Zunächst werden jedoch hinführend zwei schwächere Aussagen betrachtet und bewiesen.

Lemma 2.1. *Jeder nichtnegative Eigenvektor einer positiven Matrix $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ist positiv und der zugehörige Eigenwert ist ebenfalls positiv.*

Beweis. Es sei $\bar{v} \in \mathbb{R}^m$ ein nichtnegativer Eigenvektor von M zum Eigenwert λ . Für die i -te Komponente von \bar{v} gilt dann

$$\lambda \bar{v}_i = \sum_{j=1}^m M(i, j) \bar{v}_j.$$

Da M eine positive Matrix ist, \bar{v} nichtnegativ ist und als Eigenvektor nicht der Nullvektor sein kann, folgt, dass sowohl \bar{v}_i als auch λ positiv sind. Da diese Aussage für alle Komponenten \bar{v}_i von \bar{v} gilt, ist \bar{v} positiv. \square

Wenn die Matrix M irreduzibel ist, lassen sich die Aussagen des obigen Lemmas auf nichtnegative Matrizen übertragen.

Definition 2.2 ([6, 46]). *Eine Matrix $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ mit $m \geq 2$ heißt reduzibel, wenn eine Permutationsmatrix P existiert, sodass*

$$PMP^T = \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ 0 & M_3 \end{pmatrix}$$

erfüllt ist, wobei $M_1 \in \mathbb{R}^{m_1 \times m_1}$, $M_2 \in \mathbb{R}^{m_1 \times m_2}$ und $M_3 \in \mathbb{R}^{m_2 \times m_2}$ mit $m_1, m_2 \geq 1$ gilt. Die Nullmatrix im $\mathbb{R}^{m_2 \times m_1}$ ist mit 0 bezeichnet.

Eine Matrix M heißt irreduzibel, wenn sie nicht reduzibel ist.

Satz 2.3 ([46]). *Jeder nichtnegative Eigenvektor einer nichtnegativen irreduziblen Matrix $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ mit $m \geq 2$ ist positiv und der zugehörige Eigenwert ist ebenfalls positiv.*

Beweis. Es sei $\bar{v} \in \mathbb{R}^m$ ein nichtnegativer Eigenvektor von M zum Eigenwert λ . Der Vektor \bar{v} habe genau ℓ Nichtnulleinträge. Durch Multiplikation mit einer Permutationsmatrix $P \in \mathbb{R}^{m \times m}$ können die Nulleinträge in die letzten $m - \ell$ Komponenten des Vektors getauscht werden. Der so erhaltene Vektor sei $w \in \mathbb{R}^m$. Folglich gilt

$$w = P\bar{v} = \begin{pmatrix} \tilde{v} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Dabei enthält $\tilde{v} \in \mathbb{R}^\ell$ die positiven Einträge von \bar{v} und 0 ist der Nullvektor im $\mathbb{R}^{m-\ell}$.

Eine Matrix A wird nun durch $A = PMP^T$ definiert. Der Vektor w ist dann ein Eigenvektor von A , denn es gilt

$$Aw = (PMP^T)(P\bar{v}) = PM\bar{v} = \lambda P\bar{v} = \lambda w.$$

Nach Konstruktion gilt $w_i = 0$ für $i > \ell$. Daraus folgt

$$0 = w_i = \lambda w_i = \sum_{j=1}^m A(i, j)w_j = \sum_{j=1}^{\ell} A(i, j)\tilde{v}_j, \quad \text{für } \ell < i \leq m.$$

Da \tilde{v} ein positiver Vektor ist, gilt $A(i, j) = 0$ für $\ell < i \leq m$ und $1 \leq j \leq \ell$. Damit folgt, dass A reduzibel ist. Dann ist aber auch M reduzibel. Folglich kann der Eigenvektor \bar{v} keine Nullkomponenten besitzen.

Aus der Nichtnegativität von M und der Positivität von \bar{v} folgt, dass der Eigenwert λ zum Eigenvektor \bar{v} positiv ist [46]. \square

Der Satz von Perron und Frobenius erweitert die Aussagen des letzten Satzes und liefert die Existenz des positiven Eigenvektors in Lemma 2.1 und Satz 2.3. Insbesondere existiert genau ein bis auf skalare Vielfache eindeutig bestimmter positiver Eigenvektor. Dieser ist gleichzeitig der Eigenvektor zum betragsgrößten Eigenwert.

Satz 2.4 (Satz von Perron und Frobenius [6]). *Für jede nichtnegative und irreduzible Matrix $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ gelten die folgenden Aussagen:*

1. *Es existiert ein positiver Eigenvektor $\bar{v} \in \mathbb{R}^m$ von M zum positiven Eigenwert λ .*
2. *λ ist ein geometrisch und algebraisch einfacher Eigenwert.*
3. *Für alle Eigenwerte μ von M gilt $|\mu| \leq \lambda$.*
4. *Alle nichtnegativen Eigenvektoren von M sind positive skalare Vielfache von \bar{v} .*

Es können verschiedene Ansätze verfolgt werden, um den Satz von Perron und Frobenius zu beweisen. Berman und Plemmons [9] nutzen einen geometrischen Zugang. Sie verwenden, dass nichtnegative irreduzible Matrizen $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ auf Kegeln im \mathbb{R}^m Selbstabbildungen darstellen. Bapat und Raghavan [6] ordnen der nichtnegativen Matrix M ein Matrixspiel zu. Die Analyse der Gewinnstrategie des Spiels führt zu dem Beweis des Satzes von Perron und Frobenius. Insbesondere die Verbindung der Matrix- und Spieltheorie gibt dieser Darstellung einen besonderen Reiz.

Nach dem Satz von Perron und Frobenius ist bekannt, dass der betragsgrößte Eigenwert positiv ist. Entsprechend des folgenden Lemmas kann dieser Eigenwert durch die minimale und maximale Zeilensumme von M eingeschlossen werden.

Lemma 2.5 ([46]). *Es sei $M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine nichtnegative irreduzible Matrix. Die Zeilensummen von M seien mit r_1, r_2, \dots, r_m bezeichnet. Für den maximalen Eigenwert λ von M gilt dann*

$$\min_{i=1, \dots, m} r_i \leq \lambda \leq \max_{i=1, \dots, m} r_i.$$

Nach dieser kurzen Darstellung zur Perron-Frobenius Theorie wird im Folgenden die Faktorisierungsaufgabe für nichtnegative Matrizen allgemein eingeführt.

2.2 Die nichtnegative Matrixfaktorisierung

Im Folgenden sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Matrix vom Rang s . Das Ziel der nichtnegativen Matrixfaktorisierung besteht darin, nichtnegative Faktoren $C \in \mathbb{R}^{k \times \ell}$ und $A \in \mathbb{R}^{\ell \times n}$ (oder die Menge aller solcher Faktoren) zu bestimmen, für die

$$D = CA \tag{2.1}$$

erfüllt ist. Da der Rang von D durch s gegeben ist, muss offenbar $\ell \geq s$ erfüllt sein. Triviale Lösungen der Faktorisierungsaufgabe sind für $s = k$ beziehungsweise $s = n$ durch $D = ID$ oder $D = DI$ mit der Einheitsmatrix I entsprechenden Formats gegeben. In der Regel ist der Rang ℓ der Matrizen C und A jedoch vorgegeben und in vielen Anwendungsbeispielen ist s deutlich kleiner als n und k . Somit entfällt die triviale Lösung in diesem Fall. Für den Fall $\ell = s$, spricht man von einer nichtnegativen Rangfaktorisierung [22] oder einer nichtnegativen Voll-Rang-Faktorisierung [37]. In dieser Arbeit wird die Bezeichnung Rangfaktorisierung verwendet.

Definition 2.6 (Rangfaktorisierung [37]). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang s . Eine Zerlegung $D = \bar{C}\bar{A}$ in Faktoren $\bar{C} \in \mathbb{R}^{k \times s}$ und $\bar{A} \in \mathbb{R}^{s \times n}$ heißt Rangfaktorisierung von D .*

Existiert eine Rangfaktorisierung von D in nichtnegative Faktoren C und A , stimmen der Rang von D und der nichtnegative Rang von D überein.

Definition 2.7 (Nichtnegativer Rang [18]). *Der nichtnegative Rang $\text{rank}_+(D)$ einer Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$, $D \geq 0$ ist die kleinste natürliche Zahl s_+ für die eine Faktorisierung $D = CA$ mit Faktoren $C \in \mathbb{R}^{k \times s_+}$, $C \geq 0$ und $A \in \mathbb{R}^{s_+ \times n}$, $A \geq 0$ existiert.*

Offenbar gilt $s \leq s_+ \leq \min(k, n)$ [18].

In dieser Arbeit sollen Rangfaktorisierungen betrachtet werden, sodass sich die folgende Faktorisierungsaufgabe ergibt.

Faktorisierungsaufgabe 2.8. *Zu einer nichtnegativen Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang s , ist die Menge der nichtnegativen Faktoren $C \in \mathbb{R}^{k \times s}$ und $A \in \mathbb{R}^{s \times n}$ gesucht, für die $D = CA$ erfüllt ist.*

Wenn der Matrix D Messdaten, etwa eines physikalischen bilinearen Zusammenhangs, zugrunde liegen, tritt aufgrund von Störungen und Rauschen die Gleichung

$$D = CA + E \tag{2.2}$$

an die Stelle der Gleichung (2.1). Die Matrix $E \in \mathbb{R}^{k \times n}$ beschreibt dabei die Störung. Die Faktorisierungsaufgabe kann in dem Fall als Minimierungsaufgabe verstanden werden.

Faktorisierungsaufgabe 2.9. Zu einer nichtnegativen Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang $\tilde{s} \geq s$, ist die Menge der nichtnegativen Matrizen $C \in \mathbb{R}^{k \times s}$ und $A \in \mathbb{R}^{s \times n}$ gesucht, für die $\|D - CA\|$ minimal wird.

Als Matrixnorm kann in der Faktorisierungsaufgabe 2.9 etwa die euklidische Norm oder die Frobeniusnorm verwendet werden. Aufgrund von Störungen kann der Rang von D größer als s sein. Da CA nach Konstruktion aber eine Rang- s -Matrix ist, wird anstelle von D eine Matrix \tilde{D} vom Rang s betrachtet, für die $\|D - \tilde{D}\|$ minimal wird. Eine entsprechende Matrix \tilde{D} kann mittels der Singulärwertzerlegung von D konstruiert werden.

Satz 2.10 (Singulärwertzerlegung [28]). Für jede Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ existiert eine Faktorisierung $D = U\Sigma V^T$ mit orthogonalen Matrizen $U \in \mathbb{R}^{k \times k}$ und $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und einer Matrix $\Sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\min(n,k)}) \in \mathbb{R}^{k \times n}$, die nur auf der Diagonale von Null verschiedene Einträge hat. Diese Faktorisierung wird als Singulärwertzerlegung bezeichnet. Für die Diagonaleinträge von Σ gilt $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\min(n,k)} \geq 0$. Sie werden Singulärwerte genannt. Die Spalten von U beziehungsweise von V heißen linke beziehungsweise rechte Singulärvektoren von D .

Zur Vereinfachung werden die Spalten von U mit u_i , $1 \leq i \leq k$ und die Spalten von V mit v_i , $1 \leq i \leq n$ bezeichnet.

Für Matrizen vom Rang s sind die ersten s Singulärwerte positiv und alle weiteren sind gleich Null. Daher können die Matrizen U und V in diesem Fall auf die ersten s Spalten beschränkt werden. An die Stelle von Σ tritt dann die $(s \times s)$ -Diagonalmatrix, auf deren Diagonale die ersten s Singulärwerte stehen. Dies führt auf die abgeschnittene Singulärwertzerlegung der Matrix D vom Rang s .

Definition 2.11 (Abgeschnittene Singulärwertzerlegung). Die Singulärwertzerlegung einer Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ ist nach Satz 2.10 durch $D = U\Sigma V$ gegeben. Die abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang $r \leq \min(k, n)$ wird als $D = U_r \Sigma_r V_r^T$ mit $U_r \in \mathbb{R}^{k \times r}$, $\Sigma_r \in \mathbb{R}^{r \times r}$ und $V_r \in \mathbb{R}^{n \times r}$ definiert. Dabei gilt $U_r = (u_1, \dots, u_r)$, $V_r = (v_1, \dots, v_r)$ und $\Sigma_r = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$.

Ist der Rang von D größer als s , so ist durch ihre abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s eine Matrix \tilde{D} gegeben, für die $\|D - \tilde{D}\|$ unter allen Matrizen vom Rang s minimal wird. Dies ist gerade die Aussage des folgenden Lemmas.

Lemma 2.12 (Eckhart-Young Theorem [28, 62]). Für jede Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang s , erfüllt ihre abgeschnittene Singulärwertzerlegung $D_r = U_r \Sigma_r V_r^T$ vom Rang $r < s$ die Gleichungen

$$\min_{A, \text{rank}(A)=r} \|D - A\|_2 = \|D - D_r\|_2 = \sigma_{r+1} \quad \text{und}$$

$$\min_{A, \text{rank}(A)=r} \|D - A\|_F = \|D - D_r\|_F = \sqrt{\sum_{i=r+1}^s \sigma_i^2}.$$

Da im Folgenden Rang- s -Matrizen D (oder im Fall von Störungen Rang- s -Approximationen an D) betrachtet werden, wird zur Vereinfachung die abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s mit $U\Sigma V^T$ bezeichnet und auf den Index s verzichtet.

Nichtnegative Rangfaktorisierungen einer Matrix D oder ihrer Rang- s -Approximation können nun ausgehend von der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung konstruiert werden.

Bemerkung 2.13. Eine nichtnegative Rangfaktorisierung $D = CA$ einer Matrix D vom Rang s kann mittels der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung in der Form

$$D = \underbrace{U\Sigma T^{-1}}_C \underbrace{TV^T}_A \quad (2.3)$$

angegeben werden. Dabei ist $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$ eine reguläre Matrix. Anstelle der Matrizen C und A ist nun die Menge der Matrizen T gesucht, die zu einer nichtnegativen Faktorisierung führen.

Die Beschreibung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung ausgehend von der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung reduziert das Problem von $(k+n)s$ Unbekannten für die Einträge in den Matrizen C und A auf s^2 Unbekannte für die Einträge der Matrix T . Allerdings besitzt die Faktorisierungsaufgabe keine eindeutige Lösung.

Aus einer gegebenen Faktorisierung $D = CA$ kann durch die Multiplikation mit einer regulären Matrix $S \in \mathbb{R}^{s \times s}$ und ihrer Inversen eine weitere Faktorisierung

$$D = \underbrace{CS^{-1}}_{\tilde{C}} \underbrace{SA}_{\tilde{A}} \quad (2.4)$$

angegeben werden. Wenn S und S^{-1} nichtnegative Matrizen sind, ergibt sich zwangsläufig eine weitere nichtnegative Faktorisierung. Es können aber auch weitere Matrizen S existieren, die auf nichtnegative Faktorisierungen führen.

Lemma 2.14 ([46]). Wenn eine reguläre Matrix $S \in \mathbb{R}^{s \times s}$ und ihr Inverses $R = S^{-1}$ nichtnegative Matrizen sind, dann ist S das Produkt einer nichtnegativen und regulären Diagonalmatrix im $\mathbb{R}^{s \times s}$ und einer Permutationsmatrix im $\mathbb{R}^{s \times s}$.

Beweis. Für das Matrixprodukt RS gilt

$$\sum_{\ell=1}^s R(i, \ell) S(\ell, j) = \delta_{i,j}, \quad \text{mit } 1 \leq i, j \leq s.$$

Angenommen die i -te Zeile von R hat Nichtnulleinträge an den Positionen (i, ℓ_t) , dann folgt für $i \neq j$, dass $S(\ell_t, j) = 0$ gilt. Die Zeilen von S mit den Indizes ℓ_t haben somit nur eine Nichtnullkomponente. Wenn R in der i -ten Zeile mehr als einen Nichtnulleintrag hat, hat S folglich mehrere Zeilen, die an denselben $(s-1)$ Stellen Nulleinträge aufweisen. Diese Zeilen sind offenbar linear abhängig und S ist in diesem Fall nicht regulär. Demnach kann jede Zeile von R maximal einen Nichtnulleintrag aufweisen. Aufgrund der Regularität von R gilt weiter, dass jede Zeile und jede Spalte genau einen Nichtnulleintrag hat. Da die positiven Einträge in R beliebig sind, geht R aus der Multiplikation einer Permutationsmatrix mit einer nichtnegativen regulären Diagonalmatrix hervor. Dies gilt analog für die Matrix S [46]. \square

Aus dem Lemma 2.14 folgt, dass, wenn die Matrix S und ihre Inverse nichtnegativ sind, die Zeilen von A und Spalten von C durch die Multiplikation permutiert und neu skaliert werden. Diese Uneindeutigkeit der Lösung der Faktorisierungsaufgabe wird als *Skalierungs- und Permutationsmehrdeutigkeit* bezeichnet. Reguläre Matrizen S , die nach Gleichung (2.4) auf weitere nichtnegative Faktorisierungen führen und die nicht als Produkt von positiven Diagonalmatrizen und Permutationsmatrizen darstellbar sind, führen auf die *multiplikative Mehrdeutigkeit* der Faktorisierungsaufgabe. Diese wird in der chemometrischen Fachliteratur als *rotational ambiguity* bezeichnet, siehe beispielsweise [26, 56, 57, 65]. Obwohl die Bezeichnung anderes vermuten lässt, müssen die Matrizen S keine Rotationsmatrizen sein. Die Menge der möglichen Faktorisierungen wird in Kapitel 3 genauer untersucht.

2.3 Anwendungsbeispiele und ein Modellproblem

Die Grundidee hinter einer Vielzahl von Anwendungen nichtnegativer Matrixfaktorisierungen basiert darauf, aus einer Reihe von Messdaten von überlagerten Signalen, Rückschlüsse über die Ausgangssignale zu ziehen. Dabei wird angenommen, dass die Signale einem bilinearen Modell folgen. Die Messungen werden über einem zweidimensionalen Gitter durchgeführt und die Messwerte ergeben, entsprechend des zugrunde liegenden Gitters, Einträge der zu untersuchenden Matrix. Zur Auswertung von Messungen auf mehrdimensionalen Gittern kann die nichtnegative Tensorfaktorisierung eingesetzt werden, siehe beispielsweise [17].

2.3.1 Das Gesetz von Lambert-Beer

Als ein Beispiel für ein bilineares Modell soll das Gesetz von Lambert-Beer betrachtet werden. Während des Verlaufs einer chemischen Reaktion werden spektroskopische Messungen, etwa unter Verwendung von FTIR- oder UV/VIS-Spektrometern, durchgeführt. Dabei werden Extinktionen auf einem Zeit \times Wellenlängen-Gitter gemessen und in einer Matrix D zusammengefasst. Das Gesetz von Lambert-Beer besagt, dass die Extinktion $E_{\lambda,t}$ eines Stoffgemisches mit s Komponenten zu einer gegebenen Wellenlänge λ und zum Zeitpunkt t durch

$$E_{\lambda,t} = ([K_1(t)]\varepsilon_{1,\lambda} + [K_2(t)]\varepsilon_{2,\lambda} + \cdots + [K_s(t)]\varepsilon_{s,\lambda}) \cdot \ell, \quad (2.5)$$

gegeben ist. Für die i -te chemische Komponente bezeichnen $[K_i(t)]$ und $\varepsilon_{i,\lambda}$ die Konzentration zum Zeitpunkt t und die molare Absorptivität zur Wellenlänge λ [43]. Der Faktor ℓ gibt die Weglänge oder Schichtdicke an. Da ℓ weder vom Zeitpunkt der Messung, noch von der Wellenlänge abhängt, kann zur Vereinfachung $\ell = 1$ angenommen werden.

Für die Messungen über dem Zeit \times Wellenlängen-Gitter kann das Gesetz von Lambert-Beer in Matrixform geschrieben werden. Die Zeilen der Matrix D ergeben sich aus den Extinktionen zu einem festen Zeitpunkt und den aufsteigend geordneten Wellenlängen. Die Zeilen von D sind ebenfalls aufsteigend nach der Zeit seit Messbeginn geordnet. Die Konzentrationen der i -ten chemischen Komponente sind ihrem Zeitverlauf nach in der i -ten Spalte einer Matrix C gegeben. Die molaren Absorptivitäten der i -ten chemischen Komponente zu den aufsteigend geordneten Wellenlängen λ bilden die i -te Zeile einer Matrix A . Das Gesetz von Lambert-Beer kann nun in der Form $D = CA$ geschrieben werden, vergleiche Gleichung (2.1). Aufgrund von Störungen und Messfehlern wird in der Regel jedoch $D = CA + E$ betrachtet, siehe Gleichung (2.2). Das Ziel der Analyse ist es nun, die Faktoren $C \in \mathbb{R}^{k \times s}$ und $A \in \mathbb{R}^{s \times n}$ aus der Matrix D zu rekonstruieren. Aufgrund ihrer physikalischen Bedeutung sind C und A dabei nichtnegative Matrizen.

Zur Veranschaulichung wird ein Dreikomponentensystem mit den chemischen Komponenten X , Y und Z betrachtet. Dem Modellproblem liege die Kinetik



mit den Geschwindigkeitskonstanten $k_1 = 0.15$ und $k_2 = 0.08$ zugrunde. Die Reinkomponentenspektren der Komponenten X , Y und Z seien durch die Funktionen

$$\begin{aligned} a_X(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda - 5)^2}{40}\right) + 0.2 \exp\left(-\frac{(\lambda - 10)^2}{300}\right) \\ a_Y(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda - 30)^2}{60}\right) + 0.25 \exp\left(-\frac{(\lambda - 35)^2}{400}\right) \\ a_Z(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda - 65)^2}{40}\right) + 0.2 \exp\left(-\frac{(\lambda - 60)^2}{300}\right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

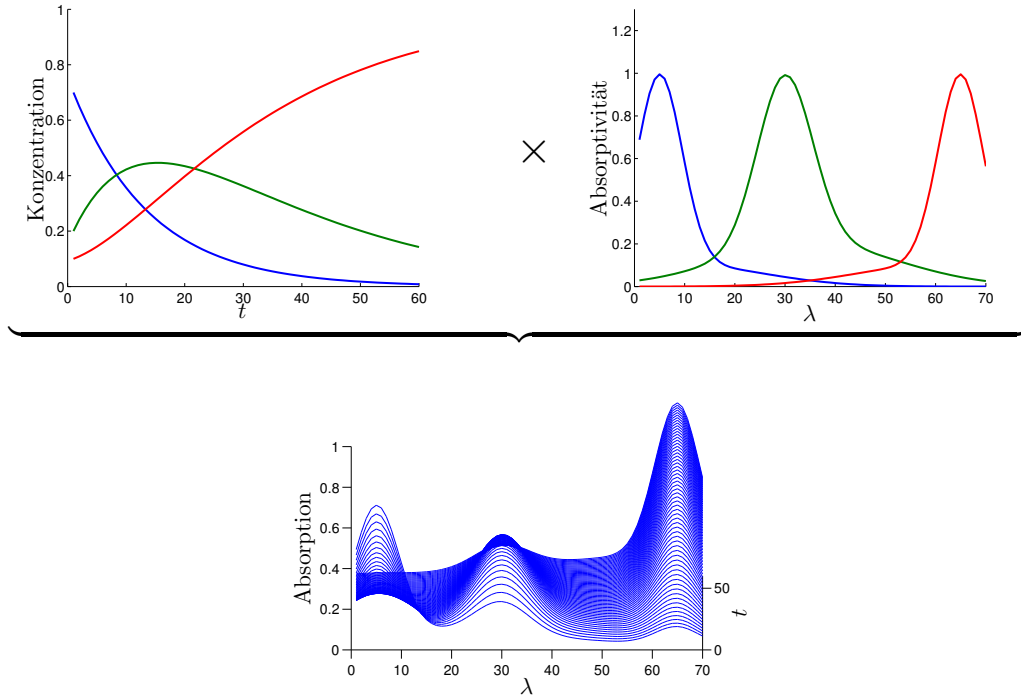


Abbildung 2.1: Darstellung zu dem Modellproblem zu den Gleichungen (2.6) und (2.7). Oben: Darstellung der Konzentrationsprofile (Spalten der Matrix C) und der Absorptionsspektren A (Zeilen der Matrix A). Unten: Zeilen der resultierenden Matrix $D = CA$ der gemischten Spektren.

gegeben. Die Konzentrationsprofile können durch das Lösen des Anfangswertproblems bestimmt werden, das durch die Kinetik zu (2.6) und die Anfangskonzentrationen (0.7, 0.2, 0.1) gegeben ist.

Die Absorptionsmatrix $A \in \mathbb{R}^{3 \times 70}$ enthält die Reinkomponentenspektren, die zu 70 diskreten Wellenlängen betrachtet werden. Die Matrix A sei nun durch

$$A = \begin{pmatrix} a_x(1) & a_x(2) & \dots & a_x(70) \\ a_y(1) & a_y(2) & \dots & a_y(70) \\ a_z(1) & a_z(2) & \dots & a_z(70) \end{pmatrix}$$

gegeben. Die Konzentrationsmatrix $C \in \mathbb{R}^{60 \times 3}$ enthält spaltenweise die Diskretisierungen der Konzentrationsprofile der Komponenten X , Y und Z zu 60 äquidistanten Stützstellen über dem Zeitintervall $[0, 29.5]$.

Als Startzeitpunkt wird $t = 0$ gewählt. Die Konzentrationen sind in Zeitabständen von 0.5 bis zum Zeitpunkt $t = 29.5$ angegeben. Die Matrix der gemischten Spektren $D \in \mathbb{R}^{60 \times 70}$ ergibt sich entsprechend des Lambert-Beerschen Gesetzes als $D = CA$. Darstellungen zu diesen drei Matrizen sind in Abbildung 2.1 gegeben.

In dem Modellbeispiel sind die Matrizen C und A bekannt. Dennoch beschreiben sie nur eine mögliche Lösung der Faktorisierungsaufgabe. In den folgenden Kapiteln wird das Modellproblem weiter untersucht und dabei auch die Nichteindeutigkeit der nichtnegativen Rangfaktorisierung von D gezeigt, vergleiche Abbildung 3.7. In Anwendungen sind die Absorptionsspektren und Konzentrationsprofile, die den gemessenen Daten zugrunde liegen, in der Regel nicht bekannt. Um diese aus der Menge aller möglichen nichtnegativen Faktorisierungen von D zu ermitteln, gibt es Ansätze die Lösungsmenge durch zusätzliche Forderungen an die Faktoren einzugrenzen [11, 31, 32, 52, 53].

2.3.2 Weitere Anwendungsbeispiele

Neben der Anwendung zur Analyse von zeitabhängigen physikalischen Prozessen, die einem bilinearen Modell folgen, kann die nichtnegative Matrixfaktorisierung in zahlreichen weiteren Zusammenhängen genutzt werden. Als ein Beispiel kann die Bildzerlegung und Komponentenerkennung genannt werden. Lee und Seung [42] beschreiben beispielsweise die Zerlegung von Gesichtsaufnahmen in signifikante Komponenten, wie etwa Augenpartie oder Kinnbereich mittels nichtnegativer Matrixfaktorisierung. Den Komponenten der Matrix D sind dabei Pixel der Aufnahmen zugewiesen und die Einträge entsprechen Zahlenwerten zu den Farbstufen von weiß bis schwarz. In der Matrix A sind die verschiedenen Gesichtspartien gespeichert. Die Matrix C beschreibt, wie diese einzelnen Partien zu kombinieren sind, um die Ausgangsabbildung zu rekonstruieren. In der Arbeit [42] wird gezeigt, dass die nichtnegative Matrixfaktorisierung eingesetzt werden kann, um einzelne relevante Teilstücke eines Objektes zu ermitteln. Dieser Zugang kann auch im medizinischen Bereich genutzt werden. So können etwa Visualisierungen von Gehirnströmen näher analysiert werden [17].

Eine Anwendung der nichtnegativen Matrixfaktorisierung in der Statistik erlaubt es, die Korrelation von diskreten Zufallsvariablen X und Y zu untersuchen [18]. Dabei werden die Wahrscheinlichkeiten unter einer weiteren diskreten Zufallsvariablen Z betrachtet, wobei X und Y unter der Bedingung Z nicht korrelieren. Die Wahrscheinlichkeit für $\{X = i, Y = j | Z = k\}$ kann dann als Produkt der Wahrscheinlichkeiten von $\{X = i | Z = k\}$ und $\{Y = j | Z = k\}$ beschrieben werden. Die Wahrscheinlichkeit $\{X = i, Y = j\}$ kann entsprechend bestimmt werden, indem Z alle möglichen Zustände durchläuft und die jeweiligen bedingten Wahrscheinlichkeiten addiert werden. Dies kann gerade als Faktorisierung in stochastische Matrizen aufgefasst werden, die ein klassisches Beispiel für nichtnegative Matrizen sind. Ein ähnlicher Anwendungsbereich ist die Untersuchung von verborgenen Markov-Ketten [19].

Neben diesen Beispielen existieren eine Reihe weiterer Anwendungen, etwa im Bereich der Genexpressionsklassifikation [17], der Demographie [18], des Text-Mining [10] oder dem Erstellen von Dokument Clustern [67].

Durch die nichtnegative Matrixfaktorisierung können aus Daten von überlagerten Signalen Rückschlüsse über die zugrunde liegenden Komponenten gezogen werden. Dies macht sie zu einem umfangreich einsetzbaren Werkzeug zur Analyse von Datenmengen. Daher ist davon auszugehen, dass die nichtnegative Matrixfaktorisierung in Zukunft weiter an Bedeutung gewinnen wird.

3 Geometrische Interpretation der nichtnegativen Matrixfaktorisierung

Nichtnegative Matrizen können mittels geometrischer Beschreibungen durch Kegel oder Polytope untersucht werden [18, 23, 40]. Mithilfe der geometrischen Betrachtungen kann etwa der nichtnegative Rang bestimmt oder die Menge der nichtnegativen Rangfaktorisierungen beschrieben werden. In diesem Kapitel wird die Beschreibung nichtnegativer Faktorisierungen durch Kegel eingeführt und der Übergang zu einer niedrigdimensionalen Darstellung aufgezeigt, wie sie etwa in [14, 41] verwendet wird.

3.1 Die Kegeldarstellung nichtnegativer Matrixfaktorisierungen

Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Matrix vom Rang s . Im Folgenden soll untersucht werden, ob zu D eine nichtnegative Rangfaktorisierung existiert. Im Existenzfall soll weiter die Menge aller nichtnegativen Rangfaktorisierungen von D bestimmt werden.

Die Zeilen von D können als Punkte im \mathbb{R}^n aufgefasst werden. Da D nichtnegativ ist, liegen alle diese Punkte im positiven Orthanten. Das folgende Lemma nutzt diese Darstellung um den nichtnegativen Rang von D zu bestimmen und nichtnegative Faktorisierungen geometrisch zu beschreiben. Dazu werden polyhedrale Kegel im positiven Orthanten betrachtet.

Definition 3.1 (polyhedraler Kegel [66]). *Als (konvexer) polyhedraler Kegel wird die positive Hülle einer endlichen Anzahl gegebener Punkte im \mathbb{R}^n bezeichnet. Ein Kegel heißt spitz (mit Spitze in 0), wenn der Koordinatenursprung ein Extrempunkt des Kegels ist.*

Als erzeugende Strahlen eines spitzen polyhedralen Kegels werden die vom Nullpunkt ausgehenden Strahlen des Kegels bezeichnet, die nicht als Konvexkombination weiterer Strahlen darstellbar sind, die ebenfalls zum Kegel gehören.

Unter einem Kegel wird im Folgenden immer ein spitzer polyhedraler Kegel verstanden.

Lemma 3.2 ([22, 40]). *Für jede nichtnegative Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ gilt $\text{rank}_+(D) = \bar{s}$ genau dann, wenn es einen Kegel \mathcal{A} im positiven Orthanten des \mathbb{R}^n mit \bar{s} erzeugenden Strahlen gibt, der den Kegel \mathcal{D} , der von den Zeilen von D aufgespannt wird, enthält und kein solcher Kegel mit weniger als \bar{s} Erzeugenden existiert. Die Erzeugenden von \mathcal{A} entsprechen Vielfachen möglicher Zeilen von A in der nichtnegativen Faktorisierung $D = CA$.*

Beweis. Aus einer gegebenen nichtnegativen Matrixfaktorisierung $D = CA$ mit $C \in \mathbb{R}^{k \times \bar{s}}$ und $A \in \mathbb{R}^{\bar{s} \times n}$ wird der Kegel \mathcal{A} konstruiert, der von den Zeilen von A im positiven Orthanten aufgespannt wird. Da die Zeilen von D nichtnegative Linearkombinationen der Zeilen von A sind, ist der von den Zeilen von D aufgespannte Kegel in \mathcal{A} enthalten. Der Kegel \mathcal{A} hat \bar{s} erzeugende Strahlen. Andernfalls gäbe es eine Zeile von A , die eine nichtnegative Linearkombination der weiteren Zeilen von A wäre. Dann existiert aber eine nichtnegative Faktorisierung $D = \tilde{C}\tilde{A}$ mit $\tilde{C} \in \mathbb{R}^{k \times (\bar{s}-1)}$ und $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{(\bar{s}-1) \times n}$, wobei \tilde{A} aus A durch Streichen der genannten Zeile hervorgeht. Dies ist ein Widerspruch zu $\text{rank}_+(D) = \bar{s}$.

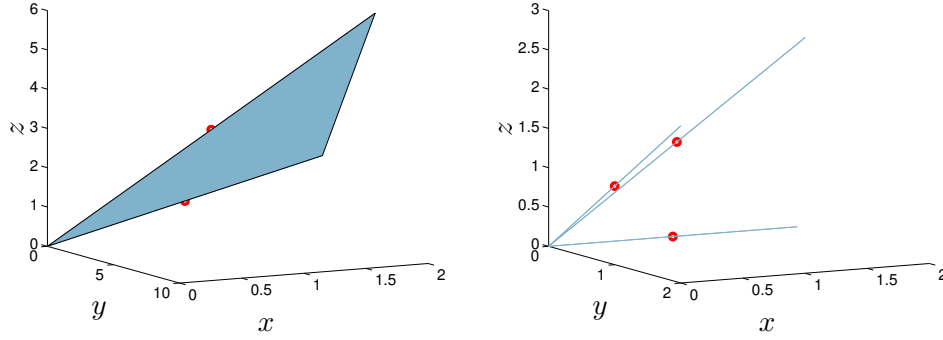


Abbildung 3.1: Darstellungen zu einer Rang-2- und einer Rang-3-Matrix $D \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$. Die Zeilen von D sind jeweils als Punkte im \mathbb{R}^3 gekennzeichnet. Links: Die Matrix D hat nichtnegativen Rang 2. Die zugehörigen Punkte sind in einem Kegel mit zwei erzeugenden Strahlen enthalten. Rechts: Die Matrix D hat nichtnegativen Rang 3.

Um die zweite Richtung zu zeigen, wird aus gegebenen Kegeln \mathcal{D} und \mathcal{A} eine Faktorisierung bestimmt. Für die Zeilen der Matrix A wird jeweils ein Punkt auf den erzeugenden Strahlen von \mathcal{A} im \mathbb{R}^n gewählt, der nicht der Nullpunkt ist. Da der Kegel \mathcal{D} in \mathcal{A} eingebettet ist, können die Zeilen von D als nichtnegative Linearkombinationen der Zeilen von A dargestellt werden. Die zugehörigen Linearkoeffizienten ergeben die Einträge der Matrix C . \square

Bemerkung 3.3. Wird anstelle der Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ die Matrix D^T betrachtet, ist eine nichtnegative Matrixfaktorisierung von D^T durch $D^T = A^T C^T$ genau dann gegeben, wenn $D = CA$ eine nichtnegative Faktorisierung von D ist. Die Aussage des Lemmas 3.2 kann dann wie folgt formuliert werden:

Für eine nichtnegative Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ gilt $\text{rank}_+(D) = \bar{s}$ genau dann, wenn es einen Kegel \mathcal{C} im positiven Orthanten des \mathbb{R}^k mit \bar{s} erzeugenden Strahlen gibt, der den Kegel \mathcal{D}^T , der von den Zeilen von D^T aufgespannt wird, enthält und kein solcher Kegel mit weniger als \bar{s} Erzeugenden existiert. Die Erzeugenden von \mathcal{C} entsprechen Vielfachen möglicher Zeilen von C^T in der nichtnegativen Faktorisierung $D^T = A^T C^T$.

Aus der Kegeldarstellung können die Zeilen der Matrix A durch die Erzeugenden des eingebetteten Kegels \mathcal{A} bestimmt werden. Die Erzeugenden können dabei beliebig im positiven Orthanten skaliert und in der Reihenfolge vertauscht werden. Für die Matrix A entspricht dies, gerade der Multiplikation mit einer positiven Diagonal- und einer Permutationsmatrix. Das bedeutet, dass die Skalierungs- und Permutationsmehrdeutigkeit der Faktorisierungsaufgabe in der Kegeldarstellung nicht berücksichtigt wird. Aus Lemma 3.2 und dem folgenden Korollar 3.4 wird deutlich, dass eine Vielzahl möglicher eingebetteter Kegel existieren kann, deren Erzeugenden nicht durch Permutation und Skalierung ineinander überführt werden können. Dies entspricht gerade der multiplikativen Mehrdeutigkeit der Faktorisierungsaufgabe, vergleiche Abschnitt 2.2.

In Abbildung 3.1 sind eingebettete Kegel zu zwei Matrizen $D \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ dargestellt, für welche die Anzahl ihrer erzeugenden Strahlen minimal ist. Eine der Matrizen hat nichtnegativen Rang 2, die andere nichtnegativen Rang 3.

Im Folgenden wird die Faktorisierungsaufgabe 2.8 betrachtet. Es werden also nichtnegative Rangfaktorisierungen untersucht. Da $D = (U\Sigma)V^T$ und $A = TV^T$ gilt, haben die

Matrizen D , A und V^T denselben Zeilenraum. Folglich können die Zeilen von D und A sowie die Erzeugenden des Kegels \mathcal{A} in Lemma 3.2 als Linearkombination der ersten s rechten Singulärvektoren von D dargestellt werden. Statt des positiven Orthanten kann in Lemma 3.2 nun der Schnitt des Orthanten mit dem von den ersten s rechten Singulärvektoren aufgespannten Unterraum betrachtet werden. Es ergibt sich das folgende Korollar.

Korollar 3.4. *Eine nichtnegative Rang- s -Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ besitzt genau dann eine nichtnegative Rangfaktorisierung $D = CA$ mit $C \in \mathbb{R}^{k \times s}$ und $A \in \mathbb{R}^{s \times n}$, wenn es einen Kegel \mathcal{A} mit s erzeugenden Strahlen gibt, der im Schnittkegel \mathcal{P} des positiven Orthanten des \mathbb{R}^n mit dem Unterraum liegt, der von den ersten s rechten Singulärvektoren von D aufgespannt wird, und A den Kegel \mathcal{D} enthält, der von den Zeilen von D aufgespannt wird. Insbesondere können die Kegel in der Basis der rechten Singulärvektoren dargestellt werden.*

Durch die Darstellung der Matrizen in der Basis der Singulärvektoren werden die Kegel statt im \mathbb{R}^n im \mathbb{R}^s betrachtet. Im Folgenden wird eine weitere Reduktion der Dimension durch das Einführen geeigneter Skalierungen erreicht.

3.2 Niedrigdimensionale Darstellung von nichtnegativen Rangfaktorisierungen

Nach Korollar 3.4 können nichtnegative Rangfaktorisierungen $D = CA$ der Matrix D vom Rang s durch ineinander gebettete Kegel im s -dimensionalen Spaltenraum von V dargestellt werden. Im Folgenden wird beschrieben, wie diese Kegel in $(s-1)$ -dimensionale Polytope überführt werden können.

3.2.1 Einführung geeigneter Skalierungen zur niedrigdimensionalen Darstellung der Faktorisierung

Um die Dimension zu reduzieren, werden statt der Kegel \mathcal{D} , \mathcal{A} und dem positiven Orthanten ihre Schnitte mit einer Hyperebene $w^T x = 1$, $w \in \mathbb{R}^n$ betrachtet [14, 48] und in der Basis der rechten Singulärvektoren von D dargestellt. Dabei ist die Hyperebene so zu wählen, dass ihr Schnitt mit dem Schnittkegel des Spaltenraums von V und dem positiven Orthanten beschränkt ist und dass w nicht senkrecht zu einem der erzeugenden Strahlen dieses Kegels ist. Unter der Annahme, dass komponentenweise $w > 0$ gilt, ist der Schnitt der Hyperebene mit dem positiven Orthanten in jedem Fall beschränkt. Im Weiteren soll stets $w > 0$ komponentenweise erfüllt sein. Die Kegel gehen durch den Schnitt in $(s-1)$ -dimensionale Polytope über. Diese können in den Raum, der von dem zweiten bis s -ten rechten Singulärvektor aufgespannt wird, projiziert werden.

Definition 3.5 (Skalierung bezüglich der Hyperebene $w^T x = 1$). *Einem Punkt $y \in \mathbb{R}^n$, der im s -dimensionalen Spaltenraum von V^T liegt, wird bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ mit $w > 0$ der Punkt \tilde{y} zugeordnet, der durch*

$$\tilde{y} = \left(\frac{v_2^T y}{w^T y}, \frac{v_3^T y}{w^T y}, \dots, \frac{v_s^T y}{w^T y} \right) \in \mathbb{R}^{s-1} \quad (3.1)$$

gegeben ist.

Eine nichtnegative Rangfaktorisierung $D = CA$ einer Matrix D vom Rang s entspricht in dieser niedrigdimensionalen Darstellung somit drei ineinander gebetteten Polytopen im \mathbb{R}^{s-1} . Das äußere Polytop beschreibt die Nichtnegativität und ist mit dem positiven Orthanten im \mathbb{R}^n verbunden. Das innere Polytop wird aus den Zeilen von D berechnet. Das

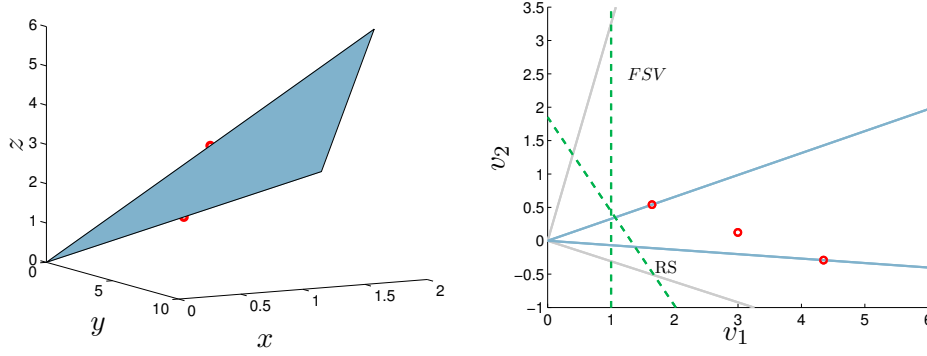


Abbildung 3.2: Darstellungen zu einer Rang-2-Matrix $D \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$. Links: Darstellung der Zeilen von D als Punkte (rot) im \mathbb{R}^3 und des minimalen eingebetteten Kegels. Rechts: Darstellung der Zeilen von D in der Basis der Singulärvektoren (rot). Der Schnittkegel $\tilde{\mathcal{P}}$ des positiven Orthanten mit dem von den Singulärvektoren aufgespannten Unterraum ist durch graue Linien gekennzeichnet. Der eingebettete Kegel $\tilde{\mathcal{D}}$ ist blau dargestellt. Die grünen Linien beschreiben die Schnittgeraden zu der RS- und der FSV-Skalierung, vergleiche die Definitionen 3.6 und 3.7.

eingeschlossene Polytop gehört zu den Zeilen eines möglichen Faktors A . Nach Korollar 3.4 existiert eine nichtnegative Rangfaktorisierung von D genau dann, wenn in dem Polytop zu dem Kegel \mathcal{P} , der sich durch den Schnitt des positiven Orthanten mit dem Spaltenraum von V ergibt, ein Polytop mit s Eckpunkten existiert, das das Polytop zum Kegel \mathcal{D} einschließt. Dabei ist die Wahl der Hyperebene $w^T x = 1$ nicht von Bedeutung. Während das innere und das äußere Polytop durch die Wahl der Hyperebene eindeutig bestimmt sind, gibt es in der Regel eine Vielzahl an eingebetteten Polytopen. Dies entspricht gerade der multiplikativen Mehrdeutigkeit der Faktorisierungsaufgabe.

Durch unterschiedliche Wahlen der Hyperebenen $w^T x = 1$ sind verschiedene Skalierungen definiert. In der FSV-Skalierung (First Singular Vector scaling) wird für w der erste rechte Singulärvektor der Matrix D verwendet [26, 33].

Definition 3.6 (FSV-Skalierung [33]). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Rang- s -Matrix, deren abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s durch $D = U \Sigma V^T$ gegeben ist. In der FSV-Skalierung wird einem Punkt y im s -dimensionalen Spaltenraum von V^T der Punkt*

$$\tilde{y} = \left(\frac{v_2^T y}{v_1^T y}, \frac{v_3^T y}{v_1^T y}, \dots, \frac{v_s^T y}{v_1^T y} \right) \in \mathbb{R}^{s-1}$$

zugeordnet. Dies entspricht einer Skalierung von y auf die Hyperebene $v_1^T x = 1$, einer Projektion auf den Unterraum, der von dem zweiten bis s -ten rechten Singulärvektor erzeugt wird und einer Darstellung in der Basis dieser Singulärvektoren.

Der erste rechte Singulärvektor v_1 von D , der für die FSV-Skalierung benötigt wird, ist der Eigenvektor von $D^T D$ zum betragsgrößtem Eigenwert [26]. Damit die Ebene $v_1^T x = 1$ alle Achsen des positiven Orthanten schneidet, soll v_1 ein positiver Vektor sein. Dies ist nach dem Satz von Perron und Frobenius 2.4 erfüllt, wenn $D^T D$ eine irreduzible Matrix ist. Für positive Matrizen D gilt dies offenbar in jedem Fall. Damit v_1 positiv ist, dürfen keine Erzeugenden von \mathcal{P} , dem Schnittkegel des positiven Orthanten mit dem Spaltenraum von

V , senkrecht auf dem ersten Singulärvektor stehen. In Theorem 2.2 in [57] wurde gezeigt, dass dies gleichbedeutend mit der Irreduzibilität von D ist.

Neben der FSV-Skalierung spielt auch die RS-Skalierung (Row Sum scaling) eine besondere Rolle [33, 48, 49]. Sie skaliert Vektoren $y \in \mathbb{R}^n$, die im Spaltenraum von V liegen, auf eine Zeilensumme von 1. Wenn der Vektor y nichtnegativ ist, entspricht dies einer Normierung bezüglich der Einsnorm.

Definition 3.7 (RS-Skalierung [33]). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Rang- s -Matrix, deren abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s durch $D = U\Sigma V^T$ gegeben ist. In der RS-Skalierung wird einem Punkt y im s -dimensionalen Spaltenraum von V der Punkt*

$$\tilde{y} = \left(\frac{v_2^T y}{e^T y}, \frac{v_3^T y}{e^T y}, \dots, \frac{v_s^T y}{e^T y} \right) \in \mathbb{R}^{s-1}$$

zugeordnet. Dabei bezeichnet e den Einsvektor im \mathbb{R}^n . Die RS-Skalierung entspricht einer Skalierung von y auf die Hyperebene $e^T x = 1$, einer Projektion auf den Unterraum, der von dem zweiten bis s -ten rechten Singulärvektor erzeugt wird und einer Darstellung in der Basis dieser Singulärvektoren.

Der Vorteil der RS- gegenüber der FSV-Skalierung besteht in der Beschränktheit des äußeren Polytops selbst für reduzible Matrizen D . In der RS-Skalierung ist das äußere Polytop stets in der Einheitskugel des \mathbb{R}^n enthalten. Dies wird im folgenden Abschnitt bewiesen. Beide Skalierungen sind in Abbildung 3.2 für eine Rang-2-Matrix dargestellt.

Weitere Möglichkeiten der Skalierung wurden in [48] untersucht. Dort wurden für den Normalenvektor w der Hyperebene $w^T x = 1$ etwa die Reinspektren eines Modellproblems oder ausgewählte Spalten der Matrix D verwendet.

3.2.2 Die begrenzenden Polytope

Wie oben dargelegt, entspricht eine nichtnegative Rangfaktorisierung $D = CA$ mit $\text{rank}_+(D) = s$ drei ineinander gebetteten $(s-1)$ -dimensionalen Polytopen. Das innere Polytop wird in der Literatur auch als INNPOL bezeichnet und das äußere Polytop als FIRPOL [14]. Die Bezeichnungen sind Abkürzungen für *inner polyhedron* beziehungsweise *first constraint polyhedron* und wurden von Borgen und Kowalski im Zusammenhang mit der Analyse von Dreikomponentensystemen eingeführt. In diesem Abschnitt sollen diese Polytope für beliebige Skalierungen definiert werden.

Das äußere Polytop geht aus der Nichtnegativitätsforderung des Faktors A hervor. Aus den rechten Singulärvektoren kann dieser Faktor entsprechend Bemerkung 2.13 als $A = TV^T$ bestimmt werden, dabei ist $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$ eine reguläre Matrix. Die Spalten von V sind durch v_1, v_2, \dots, v_s gegeben. Aufgrund der Nichtnegativität von A gilt die Ungleichung

$$T(1,1)v_1^T + T(1,2)v_2^T + \dots + T(1,s)v_s^T \geq 0. \quad (3.2)$$

Durch die Skalierung der Zeilen von A bezüglich der Hyperebene $w^T x = 1$ ergibt sich weiter

$$1 = T(1,1)v_1^T w + T(1,2)v_2^T w + \dots + T(1,s)v_s^T w.$$

Damit folgt

$$T(1,1) = \frac{1 - T(1,2)v_2^T w - \dots - T(1,s)v_s^T w}{v_1^T w}. \quad (3.3)$$

Zusammen mit der Ungleichung (3.2) folgt

$$T(1, 2) \left(v_2^T - \frac{v_2^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) + \dots + T(1, s) \left(v_s^T - \frac{v_s^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) \geq -\frac{v_1^T}{v_1^T w}. \quad (3.4)$$

Das äußere Polytop wird nun durch die Menge der Vektoren $t^T = (T(1, 2), \dots, T(1, s))$ definiert, die die Ungleichung 3.4 erfüllen. Es genügt die zweite bis s -te Komponente der Zeilen von T zu betrachten, da die erste Komponente durch die Skalierungsbedingung der Zeilen von A und die Gleichung $A = TV^T$ eindeutig bestimmt ist. Weiterhin ist es ausreichend die erste Zeile von T zu betrachten, da die Zeilen beliebig permutiert werden können.

Definition 3.8 (FIRPOL). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Rang- s -Matrix, deren abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s durch $D = U\Sigma V^T$ gegeben ist. Als äußeres Polytop (FIRPOL) bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ wird die Menge der Vektoren $t = (t_1, \dots, t_{s-1})^T \in \mathbb{R}^{s-1}$ bezeichnet, die die Ungleichung*

$$t_1 \left(v_2^T - \frac{v_2^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) + \dots + t_{s-1} \left(v_s^T - \frac{v_s^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) \geq -\frac{v_1^T}{v_1^T w} \quad (3.5)$$

komponentenweise erfüllen.

Entsprechend der Ungleichung (3.5) ergibt sich FIRPOL durch den Schnitt von Halbräumen im \mathbb{R}^{s-1} . Ist dieser Schnitt beschränkt, ergibt sich tatsächlich ein Polytop.

Bemerkung 3.9. *Polytope sind in dieser Arbeit stets beschränkte und abgeschlossene Mengen, die durch einen geschlossenen Polygonzug begrenzt sind.*

In der FSV-Skalierung ist FIRPOL genau dann beschränkt und also ein Polytop entsprechend Bemerkung 3.9, wenn die Rang- s -Matrix D irreduzibel ist [57]. In der RS-Skalierung ist das äußere Polytop stets durch die Einheitskugel des \mathbb{R}^{s-1} beschränkt.

Lemma 3.10. *Für jede Rang- s -Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ gilt, dass das äußere Polytop zur Matrix D bezüglich der RS-Skalierung in der Einheitskugel des \mathbb{R}^{s-1} liegt.*

Beweis. Aufgrund der Skalierungsbedingung $1 = A(1, :)e = T(1, :)V^T e$ und der Nichtnegativitätsforderung $A(1, :) \geq 0$ gilt

$$1 = \|A(1, :)\|_1 = \|T(1, :)V^T\|_1^2 \geq \|T(1, :)V^T\|_2^2,$$

wobei die letzte Ungleichungsbedingung aus der Cauchy-Schwarz-Ungleichung folgt [26]. Mit der orthogonalen Invarianz der euklidischen Norm ergibt sich weiter

$$\begin{aligned} 1 &\geq \|T(1, :)V^T\|_2^2 = \|T(1, :)\|_2^2 \\ &= \sum_{i=1}^s T(1, i)^2 \geq \sum_{i=2}^s T(1, i)^2 = \|t\|_2^2. \end{aligned}$$

Dies zeigt, dass in der RS-Skalierung für alle Vektoren t , die in FIRPOL liegen, $\|t\|_2 \leq 1$ gilt. Der Vektor t ergibt sich aus der zweiten bis s -ten Komponente der ersten Spalte der Matrix T . \square

Bemerkung 3.11. *Ein Punkt wird als in einem Polytop liegend bezeichnet, wenn er im Inneren oder auf dem Rand des Polytops liegt.*

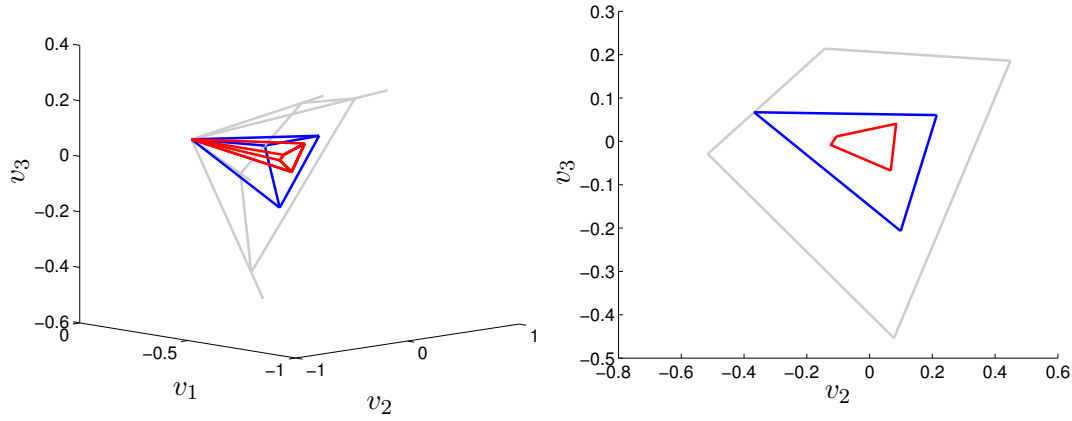


Abbildung 3.3: Darstellung zu einer nichtnegativen Faktorisierung einer Rang-3-Matrix $D \in \mathbb{R}^{7 \times 6}$ in der Basis der rechten Singulärvektoren. Links: Der Kegel \mathcal{D} , der von den Zeilen von D aufgespannt wird, ist rot gekennzeichnet. Der Kegel \mathcal{P} , der sich aus dem Schnitt des positiven Orthanten mit dem von den drei Singulärvektoren aufgespannten Unterraum ergibt, ist grau dargestellt. Der blaue Kegel ist einer möglichen nichtnegativen Faktorisierung von D zugeordnet. Rechts: Die Kegel wurden mit der Hyperebene $e^T x = 1$ geschnitten und in den Unterraum projiziert, der von v_2 und v_3 aufgespannt wird. Das rote Polygon wird als INNPOL und das graue Polygon als FIRPOL bezeichnet. Das blaue Dreieck ist einer nichtnegativen Faktorisierung von D zugeordnet.

Die Rekonstruktion der Zeilen von D durch die Faktorisierung $D = CA$ wird geometrisch durch den eingeschlossenen Kegel \mathcal{D} , der von den Zeilen von D aufgespannt wird, beschrieben. Die Zeilen von D können mittels der Singulärwertzerlegung durch

$$\begin{aligned} D(i, :) &= U(i, :) \Sigma V^T \\ &= (\sigma_1 U(i, 1), \sigma_2 U(i, 2), \dots, \sigma_s U(i, s)) V^T. \end{aligned} \quad (3.6)$$

dargestellt werden. Der Schnitt des Kegels \mathcal{D} mit der Hyperebene $w^T x = 1$ und die Projektion in den Unterraum, der von v_2 bis v_s aufgespannt wird, ergibt ein Polytop im \mathbb{R}^{s-1} . Dieses Polytop wird als inneres Polytop oder INNPOL bezeichnet. Für die Konstruktion genügt es, die Zeilen von D so zu skalieren, dass sie in der Hyperebene $w^T x = 1$ liegen. Weiter werden die Punkte in den Raum projiziert, der vom zweiten bis s -ten rechten Singulärvektor aufgespannt wird und in der Basis dieser Vektoren dargestellt.

Definition 3.12 (INNPOL). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Rang- s -Matrix, deren abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s durch $D = U \Sigma V^T$ gegeben ist. Als inneres Polytop (INNPOL) bezüglich der Skalierung-Hyperebene wird die konvexe Hülle der Punkte*

$$\left(\frac{\sigma_2 U(i, 2)}{D(i, :)w}, \frac{\sigma_3 U(i, 3)}{D(i, :)w}, \dots, \frac{\sigma_s U(i, s)}{D(i, :)w} \right)^T \in \mathbb{R}^{s-1}$$

mit $1 \leq i \leq k$ bezeichnet.

Abbildung 3.3 zeigt ein Beispiel für die Kegeldarstellung einer nichtnegativen Faktorisierung einer Rang-3-Matrix $D \in \mathbb{R}^{7 \times 6}$. Zudem sind die zugehörigen Polygone INNPOL und FIRPOL bezüglich der RS-Skalierung dargestellt.

Lemma 3.13. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Rang- s -Matrix, für die DD^T irreduzibel ist. Dann liegt der Nullpunkt in dem zu D gehörenden innere Polytop bezüglich jeder Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$, die den Kegel \mathcal{P} schneidet und für die dieser Schnitt beschränkt ist.*

Beweis. Im inneren Polytop liegen die Konvexkombinationen der skalierten Zeilen von D , projiziert auf den Unterraum, der von dem zweiten bis s -ten rechten Singulärvektor aufgespannt wird. Die skalierten Zeilen von D können durch die Zeilen der Matrix $SD \in \mathbb{R}^{k \times n}$ beschrieben werden. Dabei ist $S \in \mathbb{R}^{k \times k}$ durch die Diagonalmatrix

$$S = \text{diag} \left(\frac{1}{D(1,:)w}, \frac{1}{D(2,:)w}, \dots, \frac{1}{D(k,:)w} \right)$$

gegeben. Die Nenner der Diagonaleinträge sind positiv, da die Hyperebene $w^T x = 1$ den Kegel \mathcal{P} schneidet und die Zeilen von D in \mathcal{P} liegen. Konvexkombinationen der skalierten Zeilen von D können nun durch die Multiplikation von Vektoren $c \in \mathbb{R}^k$, $c \geq 0$ mit SD dargestellt werden. Dabei gelte für die Vektoren $\|c\|_1 = 1$. Es wird der Vektor

$$c = \frac{S^{-1}u_1}{\|S^{-1}u_1\|_1}$$

betrachtet, der bezüglich der Einsnorm normiert ist. Der Vektor u_1^T ist dabei der erste linke Singulärvektor von D . Als linker Eigenvektor von DD^T kann u_1^T nach dem Satz von Perron und Frobenius 2.4 als positiver Vektor gewählt werden. Weiter ist S^{-1} eine nichtnegative Diagonalmatrix, woraus die Nichtnegativität von c folgt. Wird nun die Konvexkombination, die durch $c^T SD$ beschrieben werden kann, betrachtet, folgt

$$\begin{aligned} c^T SD &= \frac{u_1^T S^{-1} SD}{\|S^{-1}u_1\|_1} = \frac{u_1^T D}{\|S^{-1}u_1\|_1} \\ &= \frac{u_1^T U \Sigma V^T}{\|S^{-1}u_1\|_1} = \frac{\sigma_1 v_1}{\|S^{-1}u_1\|_1}. \end{aligned}$$

Das bedeutet, dass die Konvexkombination der Zeilen von SD , deren Linearkoeffizienten durch die Komponenten von c gegeben sind, ein Vielfaches des ersten rechten Singulärvektors ist. In der niedrigdimensionalen Darstellung werden die Vektoren auf den Unterraum projiziert, der von dem zweiten bis s -ten rechten Singulärvektor aufgespannt wird. Das heißt, dass $c^T SD$ gerade auf den Nullvektor abgebildet wird. Es folgt somit, dass der Nullvektor in INNPOL enthalten ist. \square

Die in diesem Abschnitt definierten Polytope werden im Folgenden zur Charakterisierung möglicher Zeilen der Matrix A in einer nichtnegativen Faktorisierung $D = CA$ verwendet.

3.2.3 Die Menge zulässiger Lösungen und ihre geometrische Interpretation

Korollar 3.4 zeigt, dass einer nichtnegativen Rang- s -Faktorisierung $D = CA$ drei ineinander gebettete Kegel in einem s -dimensionalen Raum zugeordnet werden können. Durch den Schnitt dieser Kegel mit Hyperebenen $w^T x = 1$ gehen die Kegel in Polytope über. Das innere und äußere Polytop, die jeweils aus dem inneren und äußeren Kegel hervorgehen, wurden im vorherigen Abschnitt definiert. Diese Polytope können direkt aus der Matrix D und ihrer Singulärwertzerlegung $D = U \Sigma V^T$ berechnet werden, vergleiche die Definitionen 3.8 und 3.12. Das eingebettete Polytop beschreibt einen möglichen Faktor A . Die Menge der möglichen Zeilen der Matrix A in der niedrigdimensionalen Darstellung wird als die

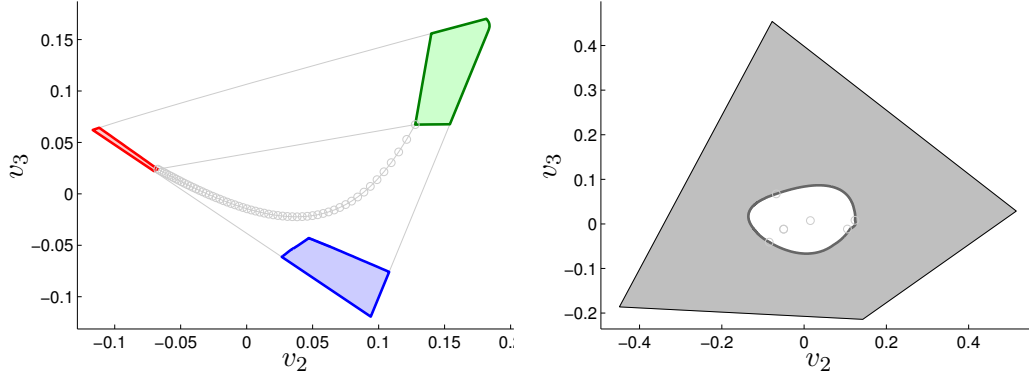


Abbildung 3.4: Links: Die Menge der zulässigen Lösungen zum Modellproblem aus Kapitel 2.3.1 in der RS-Skalierung. Die AFS besteht aus drei Flächensegmenten (rot, blau und grün). Rechts: Die Menge der zulässigen Lösungen der Matrix D aus Abbildung 3.3, ebenfalls in der RS-Skalierung. Die AFS besteht aus einer Zusammenhangskomponente mit einem Loch.

Menge der zulässiger Lösungen bezeichnet. Einer Zeile der Matrix A ist jeweils ein Punkt im inneren Polytop zugeordnet. In der Literatur wird für die Menge der zulässigen Lösungen die Bezeichnung AFS (area of feasible solutions) verwendet. Zwei Beispiele für Mengen zulässiger Lösungen sind in Abbildung 3.4 dargestellt.

Definition 3.14 (Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M}). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Rang- s -Matrix, deren abgeschnittene Singulärwertzerlegung von Rang s durch $D = U\Sigma V^T$ gegeben ist. Die Menge der zulässigen Lösungen (AFS) der Matrix D wird bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ als die Menge \mathcal{M} definiert, die durch*

$$\mathcal{M} = \{t \in \mathbb{R}^{s-1} : \exists T \in \mathbb{R}^{s \times s} : \det(T) \neq 0, T(1, 2:s) = t^T, \\ TV^T w = e, TV^T \geq 0, U\Sigma T^{-1} \geq 0\} \quad (3.7)$$

gegeben ist.

Den Punkten in der Menge der zulässigen Lösungen wird entsprechend der Definition 3.14 die zweite bis s -te Komponente einer Zeile einer regulären Matrix T zugeordnet, für die $C = U\Sigma T^{-1} \geq 0$, $A = TV^T \geq 0$ und $Aw = TV^T w = e$ gilt. Damit ergibt sich eine nichtnegative Faktorisierung $D = CA$, wobei der Zeilen von A bezüglich der Hyperebene $w^T x = 1$ skaliert sind. Die Punkte in der Menge der zulässigen Lösungen entsprechen somit gerade der niedrigdimensionalen Darstellung einer möglichen Zeilen der Matrix A . Der Eintrag in der ersten Komponente der betrachteten Zeile von T kann mittels der Skalierungsbedingung $1 = Aw = TV^T w$ berechnet werden.

Im Folgenden wird die Menge der zulässigen Lösungen in Abhängigkeit von den Polytopen INNPOL und FIRPOL betrachtet, dabei ist die Skalierung beliebig.

Satz 3.15. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Rang- s -Matrix. INNPOL und FIRPOL sind, wie in Definition 3.8 und 3.12 beschrieben, die zu D gehörenden Polytope bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Ein Punkt $t \in \mathbb{R}^{s-1}$ gehört genau dann zur Menge der zulässigen Lösungen, wenn t im äußere Polytop FIRPOL liegt und es $s-1$ weitere Punkte im äußeren Polytop gibt, sodass die konvexe Hülle dieser s Punkte das innere Polytop INNPOL enthält.*

Beweis. Zunächst wird angenommen, dass ein Punkt t zur Menge der zulässigen Lösungen gehört. Dann existiert eine Matrix $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$, für die $T(1, 2 : s) = t^T$ und $TV^T w = e$ erfüllt ist. Weiter gilt $TV^T \geq 0$, woraus folgt, dass t im äußeren Polytop FIRPOL liegen muss. Den weiteren $s - 1$ Zeilen der Matrix T können anhand ihrer zweiten bis s -ten Komponente ebenfalls Punkte im \mathbb{R}^{s-1} zugeordnet werden. Diese liegen aufgrund der Forderung $TV^T \geq 0$ ebenfalls in FIRPOL. Es bleibt zu zeigen, dass die konvexe Hülle der s Punkte INNPOL umschließt. Die Eckpunkte von INNPOL sind durch die niedrigdimensionale Darstellung der skalierten Zeilen von D gegeben. Aus der Gleichung $D = CA$ und der Skalierungsbedingung der Zeilen von A folgt

$$1 = \frac{D(i, :)w}{D(i, :)w} = \sum_{j=1}^s \frac{C(i, j)}{D(i, :)w} \underbrace{A(j, :)w}_{=1} = \sum_{j=1}^s \frac{C(i, j)}{D(i, :)w}, \quad (3.8)$$

für $1 \leq i \leq k$. Dies zeigt, dass die skalierten Zeilen von D Konvexkombinationen der Zeilen von A sind. Die Linearkoeffizienten in der Konvexkombination sind durch $C(i, j)/(D(i, :)w)$ gegeben und aufgrund der Nichtnegativität von D , C und w ebenfalls nichtnegativ. Für die niedrigdimensionale Darstellung in der Basis der rechten Singulärvektoren gilt dann ebenso, dass die Darstellung der skalierten Zeilen von D Konvexkombinationen der Projektionen der Zeilen von A sind. Daraus folgt, dass INNPOL in der konvexen Hülle der s Punkte liegt.

Um die zweite Richtung zu zeigen, wird angenommen, dass die s Punkte t_1, t_2, \dots, t_s in FIRPOL mit den gewünschten Eigenschaften gegeben sind. Durch $T(i, 2 : s) = t_i^T$ und die Skalierungsbedingung $TV^T w = e$ ist die Matrix $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$ gegeben. T ist regulär, da die zu den Zeilen gehörenden Punkte ein $(s - 1)$ -dimensionales Volumen aufspannen. Es gilt $A = TV^T \geq 0$, da andernfalls nicht alle gegebenen Punkte in FIRPOL liegen würden. Die Eckpunkte von INNPOL entsprechen niedrigdimensionalen Darstellungen der Zeilen von D und die Punkte t_1, t_2, \dots, t_s sind Darstellungen der Zeilen von $A = TV^T$. Damit entspricht die niedrigdimensionale Darstellung der skalierten Zeilen von D einer Konvexkombinationen der niedrigdimensionalen Darstellung der Zeilen von A . Die Einträge der Matrix C lassen sich nun nach Gleichung (3.8) aus den Linearkoeffizienten in den Konvexkombinationen ermitteln und sind nichtnegativ. Damit folgt, dass $C \geq 0$ gilt. Durch Multiplikation von T mit einer Permutationsmatrix von links kann erreicht werden, dass ein beliebiger Punkt von t_1, t_2, \dots, t_s der ersten Zeile der Matrix T zugeordnet ist. \square

Die Aussage des Satzes 3.15 kann mit der des Lemmas 3.2 verglichen werden, indem die Existenz von nichtnegativen Rangfaktorisierungen der Matrix D mittels eingebetteter Kegel untersucht wird. Einem Punkt, der in der Menge der zulässigen Lösungen liegt, kann in der Kegeldarstellung einem erzeugenden Strahl eines eingebetteten Kegels zugeordnet werden. Durch diese Charakterisierung der Menge der zulässigen Lösungen wird das Problem der nichtnegativen Matrixfaktorisierung in eine rein geometrische Fragestellung überführt. Aus einer gegebenen Matrix D und ihrer Singulärwertzerlegung können die Polytope INNPOL und FIRPOL bestimmt werden. An die Stelle der Suche zulässiger Faktorisierungen von D tritt nun die Suche nach Polytopen, die zwischen INNPOL und FIRPOL eingebettet sind. Diese Beschreibung wird in den folgenden Kapiteln zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen verwendet.

Die Struktur der Menge der zulässigen Lösungen kann weiter durch das folgende Lemma beschrieben werden.

Lemma 3.16. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Rang- s -Matrix und DD^T sei irreduzibel. INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.8 und 3.12 beschrieben, die zu D*

gehörenden Polytope bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Weiter sei r ein Punkt der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} von D . Der Strahl, der ausgehend vom Nullpunkt durch r verläuft, schneidet den Rand des äußeren Polytops FIRPOL im Punkt q . Dann gehören alle Konvexkombinationen von r und q zur Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} .

Beweis. Wenn r zur Menge der zulässigen Lösungen gehört, liegt r im Inneren oder auf dem Rand des Polytops FIRPOL und nach Satz 3.15 existieren $s - 1$ Punkte p_1, p_2, \dots, p_{s-1} in FIRPOL, sodass das von r und p_1, p_2, \dots, p_{s-1} aufgespannte Simplex das innere Polytop INNPOL umschließt. Der Nullpunkt liegt nach Lemma 3.13 im Polytop INNPOL und damit insbesondere im Inneren des Simplex, das von r und den Punkten p_1, p_2, \dots, p_{s-1} aufgespannt wird. Für jeden Punkt \tilde{r} , der als Konvexkombination von r und q darstellbar ist, liegt dann r im Simplex, das von \tilde{r} und p_1, p_2, \dots, p_{s-1} aufgespannt wird. Damit liegt aber auch das innere Polytop in diesem Simplex und mit Satz 3.15 folgt, dass \tilde{r} zur Menge der zulässigen Lösungen gehört. Dies beweist die Behauptung. \square

Ein alternativer Beweis ist in der Arbeit [58] angegeben. Statt des Nullpunktes kann in dem Beweis auch ein beliebiger Punkt in INNPOL verwendet werden. Der Beweis erfolgt analog. Die Wahl des Nullpunktes für die Konstruktion ist jedoch zweckmäßig, da dieser nach Lemma 3.13 im inneren Polytop liegt.

Korollar 3.17. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Rang- s -Matrix. INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.8 und 3.12 beschrieben, die zu D gehörenden Polytope bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Es sei r ein Punkt der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} von D . Der Strahl, der ausgehend von einem Punkt im Inneren oder auf dem Rand des inneren Polytops durch r verläuft, schneidet den Rand des äußeren Polytops im Punkt q . Dann gehören alle Konvexkombinationen von r und q zur Menge der zulässigen Lösungen.*

Beweis. Der Argumentation folgt dem Beweis von Lemma 3.16. \square

Satz 3.15, Lemma 3.16 sowie Korollar 3.17 ermöglichen es analytisch zu entscheiden, ob ein Punkt zur Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} gehört. Dabei ist die Wahl der verwendeten Skalierung beliebig.

Wenn ein Punkt r entsprechend Lemma 3.16 beziehungsweise Korollar 3.17 nicht weiter entlang des Strahles in Richtung des Nullpunktes oder des inneren Polytops verschoben werden kann, so gehört dieser Punkt zum inneren Rand der Menge der zulässigen Lösungen.

Definition 3.18 (Innerer und äußerer Rand von \mathcal{M}). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Rang- s -Matrix. INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.8 und 3.12 beschrieben, die zu D gehörenden Polytope bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Als innerer Rand der Menge der zulässigen Lösungen wird die Menge von Punkten r bezeichnet, für die gilt, dass für alle Simplexe $rp_1p_2 \dots p_{s-1}$, die in FIRPOL liegen und INNPOL umschließen, kein Punkt r' innerhalb des Simplex $rp_1p_2 \dots p_{s-1}$ existiert, sodass $r'p_1p_2 \dots p_{s-1}$ INNPOL ebenfalls umschließt.*

Die Menge der Punkte der AFS, die auf dem Rand von FIRPOL liegen, werden als äußerer Rand der Menge der zulässigen Lösungen bezeichnet.

In den Kapiteln 4 und 6 werden die obigen Resultate für die geometrische und numerische Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen verwendet. Dabei kann die Wahl der Skalierungs-Hyperebene für die numerische Stabilität von Bedeutung sein. Dies wird im folgenden Abschnitt an einem Beispiel erläutert.

3.2.4 Bedeutung der Irreduzibilität von $D^T D$ in der FSV-Skalierung

In Abschnitt 3.2.1 wurde aufgezeigt, dass die Menge möglicher Zeilen des Faktors A durch den Schnitt mit einer Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ niedrigdimensional darstellbar ist. Für die Skalierung ist es notwendig, dass der Schnitt der Hyperebene $w^T x = 1$ mit dem Schnittkegel \mathcal{P} des positiven Orthanten mit dem Spaltenraum von V beschränkt ist. In der FSV-Skalierung, bei der für w der erste rechte Singulärvektor v_1 von D gewählt wird, ist dies nach dem Satz von Perron und Frobenius 2.4 erfüllt, wenn die Matrix $D^T D$ irreduzibel ist.

Im Folgenden wird eine Matrizenfolge D_m , $m \in \mathbb{N}$ konstruiert, die numerisch unter Beachtung der Maschinengenauigkeit gegen eine Matrix D konvergiert, für die $D^T D$ reduzibel ist. Die Matrizenfolge D_m , $m \in \mathbb{N}$ ergibt sich aus dem Produkt $D_m = C_m A_m$. Die Spalten der Matrix $C_m \in \mathbb{R}^{60 \times 3}$ sind durch Diskretisierungen der Funktionen

$$\begin{aligned} c_{m,1}(t) &= \exp\left(-\frac{(t-1)^2}{200 \cdot 0.5^m}\right) \\ c_{m,2}(t) &= \exp\left(-\frac{(t-30)^2}{300 \cdot 0.5^m}\right) \\ c_{m,3}(t) &= \exp\left(-\frac{(t-60)^2}{200 \cdot 0.5^m}\right), \end{aligned}$$

in der Form

$$C_m(i, j) = c_{m,j}(i), \quad 1 \leq i \leq 60, 1 \leq j \leq 3 \quad (3.9)$$

gegeben. Die Zeilen des Faktors $A_m \in \mathbb{R}^{3 \times 70}$ sind durch Diskretisierungen der Funktionen

$$\begin{aligned} a_{m,1}(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda-5)^2}{40 \cdot 0.9^m}\right) + 0.2^{(m+1)} \exp\left(-\frac{(\lambda-10)^2}{300}\right) \\ a_{m,2}(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda-30)^2}{60 \cdot 0.9^m}\right) + 0.25^{(m+1)} \exp\left(-\frac{(\lambda-35)^2}{400}\right) \\ a_{m,3}(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda-65)^2}{40 \cdot 0.9^m}\right) + 0.2^{(m+1)} \exp\left(-\frac{(\lambda-60)^2}{300}\right). \end{aligned}$$

als

$$A_m(i, j) = a_{m,i}(j), \quad 1 \leq i \leq 3, 1 \leq j \leq 70 \quad (3.10)$$

gegeben.

Ein wachsender Index m bewirkt, dass die Gauß-Kurven, deren Diskretisierung die Spalten von C_m bilden, kleinere Halbwertsbreiten aufweisen. Die Funktionen, deren Diskretisierung die Zeilen von A_m liefern, setzen sich als Summe von zwei Gauß-Kurven zusammen. Bei zunehmendem m wird die Gauß-Kurve mit der größeren Halbwertsbreite jeweils schwächer gewichtet und zudem wird die Halbwertsbreite der stärker gewichteten Kurve verringert. Die Spalten der Faktoren C_0 , C_1 und C_2 und die Zeilen von A_0 , A_1 und A_2 sind in Abbildung 3.5 dargestellt und verdeutlichen dieses Verhalten.

Bei exakter Rechnung sind C_m und A_m positive Matrizen. Sind Matrixeinträge jedoch so klein, dass die nächste in der Rechnerarithmetik darstellbare Zahl Null ist, werden sie in der numerischen Berechnung auf Null gesetzt. Für ein hinreichend großes m ist der Matrix C_m innerhalb der Rechnerarithmetik die Matrix \tilde{C}_m der Form

$$\tilde{C}_m = \begin{pmatrix} c_1 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 \end{pmatrix}$$

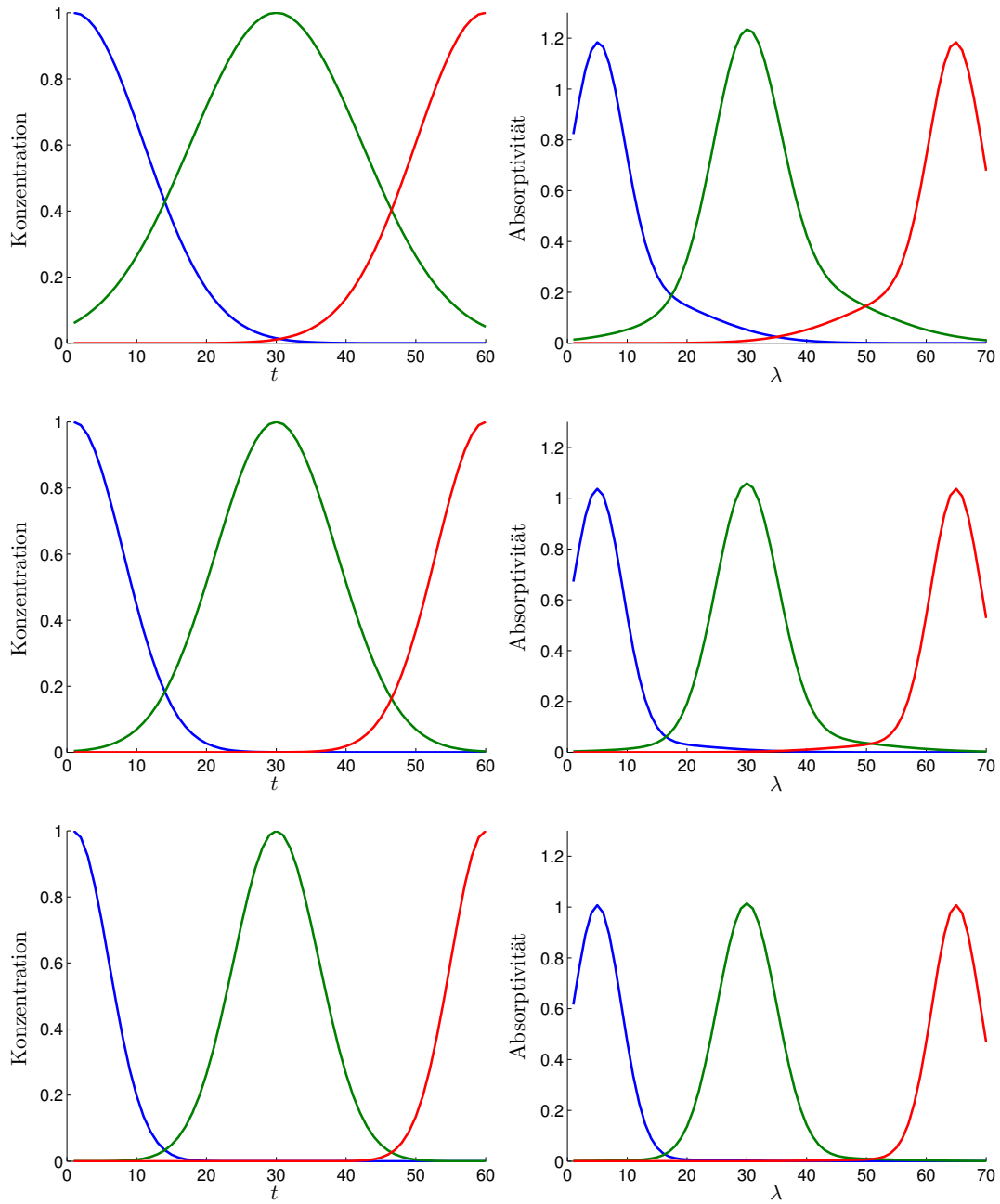


Abbildung 3.5: Darstellung zu den Faktoren C_m und A_m aus den Gleichungen (3.9) und (3.10) für $0 \leq m \leq 2$. Die linke Spalte zeigt die Spalten der Matrizen C_m und die rechte Spalte die Zeilen der Matrizen A_m , jeweils für wachsenden Index m .

zugeordnet. Dabei sind $c_1 \in \mathbb{R}^{k_1}$, $c_2 \in \mathbb{R}^{k_2}$ und $c_3 \in \mathbb{R}^{k_3}$ durch Spaltenvektoren gegeben und es gilt $k_1 + k_2 + k_3 = k$. Die Nullvektoren haben die entsprechenden Dimensionen. Für hinreichend großes m ist A_m in der Rechnerarithmetik durch die Matrix \tilde{A}_m in der Gestalt

$$\tilde{A}_m = \begin{pmatrix} a_1^T & a_2^T & 0 \\ a_3^T & a_4^T & 0 \\ 0 & 0 & a_5^T \end{pmatrix}$$

gegeben. Dabei sind $a_1, a_3 \in \mathbb{R}^{n_1}$, $a_2, a_4 \in \mathbb{R}^{n_2}$ und $a_5 \in \mathbb{R}^{n_3}$ Spaltenvektoren. Es gilt $n_1 + n_2 + n_3 = n$ gilt und die Nullvektoren haben die entsprechenden Dimensionen.

Die Matrix \tilde{D}_m ergibt sich nun als Produkt von \tilde{C}_m und \tilde{A}_m . Dann hat $\tilde{D}_m^T \tilde{D}_m$ die Gestalt

$$\tilde{D}_m^T \tilde{D}_m = \begin{pmatrix} D_{m,1} & D_{m,2} & 0 \\ D_{m,3} & D_{m,4} & 0 \\ 0 & 0 & D_{m,5} \end{pmatrix}$$

mit Blockmatrizen $D_{m,1}$, $D_{m,2}$, $D_{m,3}$, $D_{m,4}$ und $D_{m,5}$ entsprechender Größen. Die Matrix $\tilde{D}_m^T \tilde{D}_m$ ist damit reduzibel und die FSV-Skalierung kann nicht angewendet werden.

Für die Matrizen D_0 , D_1 und D_2 sind die Mengen der zulässigen Lösungen in RS- und FSV-Skalierung in Abbildung 3.6 gegeben. Während die AFS in der RS-Skalierung nach Lemma 3.10 beschränkt ist und innerhalb des Einheitskreises liegt, ist die AFS in der FSV-Skalierung nicht beschränkt. In Abbildung 3.6 kann beobachtet werden, dass die Fläche des äußeren Polygons signifikant zunimmt. Dieses Verhalten kann so begründet werden, dass in der FSV-Skalierung der Anteil des ersten rechten Singulärvektors an den Erzeugenden des Kegels \mathcal{P} auf 1 skaliert wird. Im Fall der Reduzibilität von $D^T D$ existiert ein erzeugender Strahl von \mathcal{P} , der senkrecht zum ersten rechten Singulärvektor steht. Aufgrund der Konvergenz der Matrizenfolge D_m gegen eine Matrix D , für die $D^T D$ reduzibel ist, nimmt der Anteil des ersten rechten Singulärvektors an mindestens einem der erzeugenden Strahlen von \mathcal{P} ab und der Schnitt des Stahls mit der Hyperebene $v_1^T x = 1$ erfolgt in zunehmend größerem Abstand zum Nullpunkt.

In der Anwendung sind solche Beispiele, in der die FSV-Skalierung nicht verwendet werden kann, von geringer Bedeutung. In dem obigen Beispiel könnte etwa die letzte Zeile von \tilde{A}_m bis auf Skalierung direkt aus der Matrix \tilde{D}_m extrahiert werden, da die erste und zweite Zeile von \tilde{A}_m an den Stellen Null sind, an denen die dritte Zeile Nichtnulleinträge aufweist. An dem Beispiel wird aber deutlich, dass auch wenn die Matrix $D^T D$ irreduzibel ist, das Polytop FIRPOL in der FSV-Skalierung ein deutlich größeres Volumen als in der RS-Skalierung einnehmen kann. Eine Berechnung der AFS in der RS-Skalierung kann dann zu stabileren numerischen Ergebnissen führen, da in diesem Fall eine obere Schranke für das Volumen existiert, vergleiche Lemma 3.10.

3.3 Verallgemeinerung des geometrischen Zugangs für gestörte Daten

Anstelle der nichtnegativen Matrixfaktorisierung ist für die Anwendung auf Messdaten eine Faktorisierung zu bevorzugen, in der betragskleine negative Einträge in den Faktoren zugelassen werden. Liegen beispielsweise Daten zu spektroskopischen Messungen vor, können negative Einträge in der Matrix D etwa durch das Abziehen eines Hintergrundspektrums zustande kommen, da die gemessenen Spektren störungsbehaftet sind. Zudem ist der Rang einer Matrix D von Messdaten, deren Zeilen sich durch Superposition von s

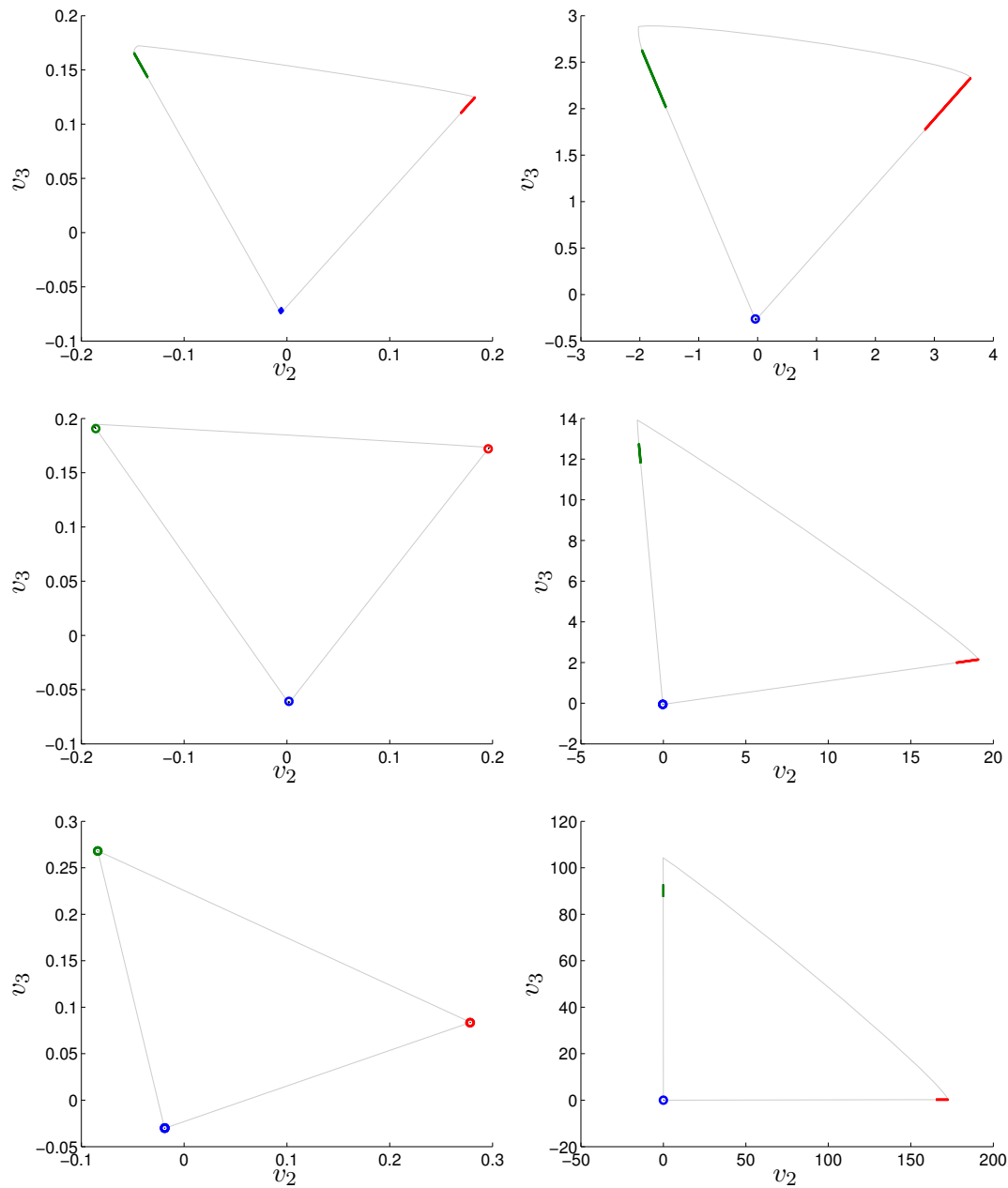


Abbildung 3.6: Darstellung der Menge der zulässigen Lösungen und des äußeren Polygons für die Matrizen D_0 , D_1 und D_2 . Es liegen jeweils drei Flächen-segmente vor. In der linken Spalte ist die Darstellung in der RS-Skalierung und in der rechten Spalte in der FSV-Skalierung angegeben. Sehr kleine Flächen-segmente sind zur Verdeutlichung mit einem Kreis umschrieben.

Vektoren ergeben, aufgrund von Störungen nicht exakt s . Dieses Problem wurde in Kapitel 2 als Faktorisierungsaufgabe 2.9 beschrieben. Anstelle der Matrix D wird dann ihre Niedrigrangapproximation betrachtet. Diese kann ebenfalls betragskleine negative Einträge aufweisen. Aber auch für nichtnegative Approximationen ist es aufgrund von Störungen möglich, dass keine nichtnegative Faktorisierung existiert. Um dennoch physikalisch bedeutungsvolle Lösungen zu erhalten, ist es zweckmäßig betragskleine negative Einträge in den Faktoren zuzulassen. Solche Faktorisierungen werden in dieser Arbeit als approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierung bezeichnet. Die negativen Einträge in den Faktoren C und A sind dabei nach unten beschränkt. Es soll $A \geq -\varepsilon_A$ und $SC \geq -\varepsilon_C$ erfüllt sein, wobei S die in Definition 3.19 gegebene Skalierungsmatrix ist.

In diesem Abschnitt wird die Menge der zulässigen Lösungen bezüglich der Skalierungshyperebene $w^T x = 1$ definiert. Die RS- oder FSV-Skalierung können als Spezialfälle abgeleitet werden. Durch die Wahl von $\varepsilon_C = \varepsilon_A = 0$ ist der Übergang zur klassischen Menge der zulässigen Lösungen für nichtnegative Faktorisierungen gegeben.

Definition 3.19 (verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Rang- s -Matrix, deren abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s durch $D = U\Sigma V^T$ gegeben ist. Als verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen bezüglich der Skalierungshyperebene $w^T x = 1$ sowie der Parameter $\varepsilon_C \geq 0$ und $\varepsilon_A \geq 0$ wird die Menge bezeichnet, die durch*

$$\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A} = \left\{ t \in \mathbb{R}^{s-1} : \exists T \in \mathbb{R}^{s \times s} : \det(T) \neq 0, T(1, 2:s) = t^T, \right. \\ \left. TV^T w = e, TV^T \geq -\varepsilon_A, SU\Sigma T^{-1} \geq -\varepsilon_C \right\} \quad (3.11)$$

gegeben ist. Dabei ist $S \in \mathbb{R}^{k \times k}$ die Diagonalmatrix

$$S = \text{diag} \left(\frac{1}{D(1, :)w}, \frac{1}{D(2, :)w}, \dots, \frac{1}{D(k, :)w} \right), \quad (3.12)$$

die die Zeilen von D in die Hyperebene $w^T x = 1$ skaliert.

In Abbildung 3.7 sind die klassische Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} und eine verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ zu dem Modellproblem aus Kapitel 2.3.1 dargestellt.

Die verallgemeinerte AFS ist so definiert, dass eine Übertragung der geometrischen Beschreibung aus Satz 3.15 möglich ist. Dabei werden statt der konvexen Hülle der s Punkte in FIRPOL jedoch Affinkombinationen dieser Punkte betrachtet. Bevor diese Charakterisierung der Punkte der AFS angegeben werden kann, ist zunächst die Definition des äußeren Polytops FIRPOL für die approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierung zu verallgemeinern.

Das verallgemeinerte äußere Polytop geht aus der komponentenweisen Ungleichung $A \geq -\varepsilon_A$ hervor. Die Matrix A kann entsprechend Bemerkung 2.13 als $A = TV^T$ geschrieben werden. Für die erste Zeile von A ergibt sich

$$T(1, 1)v_1^T + T(1, 2)v_2^T + \dots + T(1, s)v_s^T \geq -\varepsilon_A. \quad (3.13)$$

Aus der Skalierungsbedingung $w^T x = 1$ folgt für die Zeilen von A

$$1 = T(1, 1)v_1^T w + T(1, 2)v_2^T w + \dots + T(1, s)v_s^T w.$$

Damit gilt

$$T(1, 1) = \frac{1 - T(1, 2)v_2^T w - \dots - T(1, s)v_s^T w}{v_1^T w}. \quad (3.14)$$

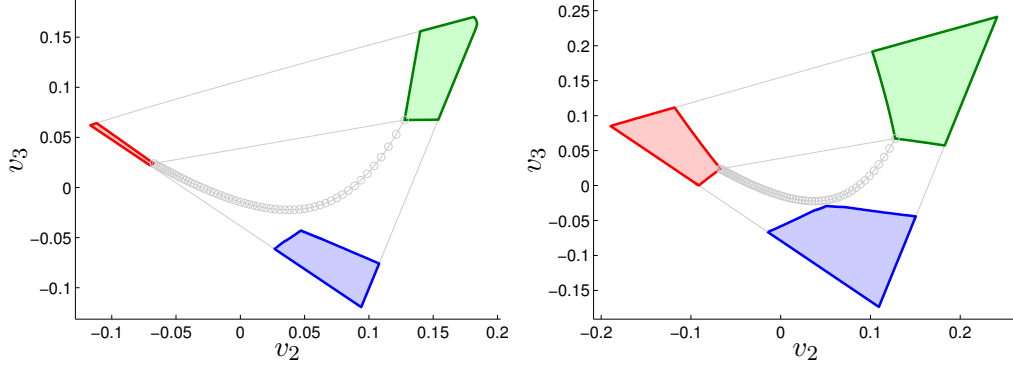


Abbildung 3.7: Darstellung der Menge der zulässigen Lösungen für das Modellproblem aus Kapitel 2.3.1. Links: klassische Menge zulässiger Lösungen mit den Parametern $\varepsilon_A = \varepsilon_C = 0$ in der RS-Skalierung. Rechts: Verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen mit $\varepsilon_A = 0.01$ und $\varepsilon_C = 0.001$ in der RS-Skalierung. Die AFS besteht jeweils aus drei Flächensegmenten. Für die verallgemeinerte AFS ist ein Flächenzuwachs der Segmente zu erkennen.

Zusammen mit der Ungleichung (3.13) ergibt sich

$$T(1, 2) \left(v_2^T - \frac{v_2^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) + \dots + T(1, s) \left(v_s^T - \frac{v_s^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) \geq -\varepsilon_A - \frac{v_1^T}{v_1^T w}. \quad (3.15)$$

Definition 3.20 (Verallgemeinertes äußeres Polytop FIRPOL). *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Rang- s -Matrix, deren abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s durch $D = U\Sigma V^T$ gegeben ist. Das verallgemeinerte äußere Polytop (FIRPOL) für den Parameter $\varepsilon_A \geq 0$ bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ ist durch die Menge der Vektoren $t = (t_1, \dots, t_{s-1})^T \in \mathbb{R}^{s-1}$ definiert, die die Ungleichung*

$$t_1 \left(v_2^T - \frac{v_2^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) + \dots + t_{s-1} \left(v_s^T - \frac{v_s^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) \geq -\varepsilon_A - \frac{v_1^T}{v_1^T w}$$

komponentenweise erfüllen.

Bemerkung 3.21. *Da das innere Polytop INNPOL durch die konvexe Hülle der skalierten Zeilen von D in der niedrigdimensionalen Darstellung gegeben ist, liegt INNPOL genau dann im verallgemeinerten äußeren Polytop zum Parameter $\varepsilon_A \geq 0$, wenn die Ungleichung $SD \geq -\varepsilon_A$ komponentenweise erfüllt ist. Dabei ist S die Diagonalmatrix entsprechend Gleichung (3.12), die die Zeilen von D bezüglich der Hyperebene $w^T x = 1$ skaliert*

Mithilfe des inneren Polytops und des verallgemeinerten äußeren Polytops kann die verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ geometrisch analog zu Satz 3.15 charakterisiert werden.

Satz 3.22. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang s . INNPOL und FIRPOL sind, wie in Definition 3.12 und 3.20 beschrieben die zu D gehörenden Polytope bezüglich des Parameters ε_A und der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Ein Punkt $t \in \mathbb{R}^{s-1}$ gehört genau dann zur verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$, wenn t im äußeren Polytop FIRPOL liegt und in FIRPOL $(s-1)$ weitere Punkte existieren, sodass die Eckpunkte*

von INNPOL Affinkombinationen dieser s Punkte sind und die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind.

Beweis. Zunächst wird angenommen, dass ein Punkt t zur verallgemeinerten AFS gehört. Dann existiert eine Matrix $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$, für die $T(1, 2 : s) = t^T$ und $TV^T w = e$ erfüllt ist. Weiter gilt $TV^T \geq -\varepsilon_A$. Daraus folgt, dass t innerhalb des verallgemeinerten äußeren Polytops FIRPOL liegen muss. Den weiteren $s - 1$ Zeilen der Matrix T können anhand ihrer zweiten bis s -ten Komponente ebenfalls Punkte im \mathbb{R}^{s-1} zugeordnet werden. Diese Punkte liegen aufgrund der Forderung $TV^T \geq -\varepsilon_A$ ebenfalls in FIRPOL. Es bleibt zu zeigen, dass die Eckpunkte von INNPOL geeignete Affinkombinationen dieser s Punkte sind. Die Eckpunkte von INNPOL sind durch die konvexe Hülle der niedrigdimensionalen Darstellung der skalierten Zeilen $D(i, :)/(D(i, :)w)$ von D gegeben. Aus der Gleichung $D = CA$ folgt

$$1 = \frac{D(i, :)w}{D(i, :)w} = \sum_{j=1}^s \frac{C(i, j)}{D(i, :)w} \underbrace{A(j, :)w}_{=1} = \sum_{j=1}^s \frac{C(i, j)}{D(i, :)w}. \quad (3.16)$$

Dies zeigt, dass die skalierten Zeilen von D Affinkombinationen der Zeilen von A sind. Folglich sind auch die niedrigdimensionalen Darstellungen der Zeilen von D Affinkombinationen der niedrigdimensionalen Darstellung der Zeilen von A . Die Linearkoeffizienten in der Affinkombination sind durch $C(i, j)/(D(i, :)w)$ gegeben. Diese entsprechen aber gerade den Einträgen der Matrix SC , siehe Gleichung (3.12). Da t zur verallgemeinerten AFS gehört, sind diese Koeffizienten größer oder gleich $-\varepsilon_C$, womit die Behauptung gezeigt ist.

Um die zweite Richtung zu zeigen, wird angenommen, dass s Punkte t_1, t_2, \dots, t_s in FIRPOL mit den gewünschten Eigenschaften gegeben sind. Durch $T(i, 2 : s) = t_i^T$ und die Skalierungsbedingung $TV^T w = e$ ist die Matrix $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$ gegeben. T ist regulär, da die zu den Zeilen gehörenden Punkte ein $(s - 1)$ -dimensionales Volumen aufspannen. Es gilt $TV^T \geq -\varepsilon_A$, da andernfalls nicht alle gegebenen Punkte im verallgemeinerten äußeren Polytop liegen würden. Die Eckpunkte von INNPOL sind durch die niedrigdimensionale Darstellung der skalierten Zeilen von D gegeben und die Punkte t_1, t_2, \dots, t_s entsprechen einer Darstellung der Zeilen von $A = TV^T$. Damit entsprechen die niedrigdimensionalen Darstellungen der skalierten Zeilen von D Affinkombinationen der Darstellung der Zeilen von A . Die Einträge der Matrix C lassen sich nach Gleichung (3.16) aus den Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen ermitteln. Da die Linearkoeffizienten größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind, folgt nach Gleichung (3.12), dass $SC \geq -\varepsilon_C$ gilt. Durch Multiplikation von T mit einer Permutationsmatrix kann erreicht werden, dass ein beliebiger Punkt von t_1, t_2, \dots, t_s der ersten Zeile der Matrix T zugeordnet ist. \square

Für nichtnegative Matrixfaktorisierungen wurde die topologische Struktur der Menge der zulässigen Lösungen mittels des Lemmas 3.16 weiter charakterisiert. Eine ähnliche Aussage kann auch für die approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierung bewiesen werden.

Lemma 3.23. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang s . INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.12 und 3.20 beschrieben die zu D gehörenden Polytope bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ und dem Parameter $\varepsilon_A \geq 0$. Weiter sei r ein Punkt der Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ von D und es existieren Punkte p_1, p_2, \dots, p_{s-1} in FIRPOL, sodass die konvexe Hülle von r und p_1, p_2, \dots, p_{s-1} den Nullpunkt enthält. Zudem seien die Eckpunkte von INNPOL als Affinkombination der Punkte r und p_1, p_2, \dots, p_{s-1} darstellbar, wobei die Entwicklungskoeffizienten der Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind. Der Strahl, der ausgehend vom Nullpunkt durch r verläuft, schneidet das äußere Polytop im Punkt q . Dann gehören alle Konvexkombinationen von r und q zur Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$.*

Beweis. Die Eckpunkte des Polytops INNPOL seien mit \mathcal{I}_i bezeichnet. Jeder dieser Eckpunkte lässt sich als Affinkombination von r und p_1, p_2, \dots, p_{s-1} in der Form

$$\mathcal{I}_i = \alpha_{i,1}p_1 + \alpha_{i,2}p_2 + \dots + \alpha_{i,s-1}p_{s-1} + \alpha_{i,s}r$$

mit Entwicklungskoeffizienten $\alpha_{i,j} \geq -\varepsilon_C$, $1 \leq j \leq s$ darstellen. Für die Koeffizienten gilt dann $\sum_{j=1}^s \alpha_{i,j} = 1$.

Ein Punkt \tilde{r} , der auf der Strecke zwischen r und q liegt, kann als

$$\tilde{r} = (1 + \lambda)r$$

mit $\lambda \geq 0$ ausgedrückt werden. Diese Darstellung ergibt sich, da der Punkt \tilde{r} auf einem Strahl liegt, der vom Nullpunkt ausgeht und durch r verläuft. Es folgt, dass sich die Eckpunkte von INNPOL als Linearkombination in der Form

$$\mathcal{I}_i = \alpha_{i,1}p_1 + \alpha_{i,2}p_2 + \dots + \alpha_{i,s-1}p_{s-1} + \frac{\alpha_{i,s}}{1 + \lambda}\tilde{r} \quad (3.17)$$

darstellen lassen. Da die Summe der Linearkoeffizienten nicht 1 ergibt, handelt es sich aber nicht um eine Affinkombination.

Der Nullpunkt ist als Konvexkombination von p_1, p_2, \dots, p_{s-1} und r darstellbar. Nach Definition von \tilde{r} kann er dann auch als Konvexkombination von p_1, p_2, \dots, p_{s-1} und \tilde{r} geschrieben werden, sodass

$$0 = \beta_1p_1 + \beta_2p_2 + \dots + \beta_{s-1}p_{s-1} + \beta_s\tilde{r} \quad (3.18)$$

mit $\beta_j \geq 0$, $1 \leq j \leq s$ und $\sum_{j=1}^s \beta_j = 1$ gilt.

Nun kann ein Vielfaches der Gleichung (3.18) zu (3.17) addiert werden, sodass sich die Eckpunkte \mathcal{I}_i von INNPOL als Affinkombination von p_1, p_2, \dots, p_{s-1} und \tilde{r} ergeben. Dies führt auf die Gleichungen

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_i &= \left(\alpha_{i,1}p_1 + \alpha_{i,2}p_2 + \dots + \alpha_{i,s-1}p_{s-1} + \frac{\alpha_{i,s}}{1 + \lambda}\tilde{r} \right) \\ &\quad + \frac{\lambda\alpha_{i,s}}{1 + \lambda}(\beta_1p_1 + \beta_2p_2 + \dots + \beta_{s-1}p_{s-1} + \beta_sr) \\ &= \left(\alpha_{i,1} + \frac{\lambda\alpha_{i,s}}{1 + \lambda}\beta_1 \right) p_1 + \dots + \left(\alpha_{i,s-1} + \frac{\lambda\alpha_{i,s}}{1 + \lambda}\beta_{s-1} \right) p_{s-1} \\ &\quad + \left(\frac{\alpha_{i,s}}{1 + \lambda} + \frac{\lambda\alpha_{i,s}}{1 + \lambda}\beta_s \right) \tilde{r}. \end{aligned}$$

Die Summe der Koeffizienten vor den Punkten p_1, p_2, \dots, p_{s-1} und r ergibt gerade 1, sodass es sich um eine Affinkombination handelt. Da die Linearkoeffizienten β_j der Konvexkombination nichtnegativ sind, ergibt sich, dass die Linearkoeffizienten der Affinkombination größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind. Aus Satz 3.22 folgt nun, dass der Punkt \tilde{r} zur Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ der approximativ nichtnegativen Matrixfaktorisierung gehört. \square

Durch das Lemma 3.23 können Punkte auf dem inneren Rand der AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ charakterisiert werden. Wenn der Punkt r auf dem Strahl nicht in Richtung des Nullpunktes verschoben werden kann, sodass er weiter zur AFS gehört, dann handelt es sich um einen Punkt des inneren Rands.

Definition 3.24 (Innerer und äußerer Rand von $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$). Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang s . INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.12 und 3.20 beschrieben, die zu D gehörenden Polytope bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ und dem Parameter $\varepsilon_A \geq 0$. Als innerer Rand der Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ wird die Menge von Punkten r bezeichnet, für die gilt, dass für alle Simplexe $rp_1 p_2 \dots p_{s-1}$,

- deren Eckpunkte im Inneren oder auf dem Rand von FIRPOL liegen und
- für die die Eckpunkte von INNPOL als Affinkombinationen der Punkte $r, p_1, p_2, \dots, p_{s-1}$ darstellbar sind und die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind

kein Punkt r' innerhalb des Simplex $rp_1 p_2 \dots p_{s-1}$ existiert, sodass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen der Eckpunkte von $r' p_1 p_2 \dots p_{s-1}$ sind und die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind.

Die Punkte der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$, die auf dem Rand von FIRPOL liegen, werden als äußerer Rand bezeichnet.

Die Definition ist analog zu der Definition von 3.18, nur werden an Stelle der konvexen Hülle nun Affinkombinationen betrachtet, in denen die Entwicklungskoeffizienten nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind.

Die Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ der approximativ nichtnegativen Matrixfaktorisierung hängt von den Parametern ε_C und ε_A ab. Der Parameter ε_A beeinflusst die Größe des Polytops FIRPOL und ist so zu wählen, dass INNPOL in FIRPOL enthalten ist. Dies ist insbesondere zu berücksichtigen, wenn negative Einträge in D auftreten, denn für den Parameter $\varepsilon_A = 0$ existieren dann Bereiche von INNPOL, die außerhalb von FIRPOL liegen. Der Parameter ε_C ist in Abhängigkeit von der erwarteten Störung zu wählen. Im Zweifelsfall sollten beide Parameter größer gewählt werden, da dies zu einer Vergrößerung der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen führt, wie im Folgenden gezeigt wird.

Satz 3.25. Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang s . Die Menge der verallgemeinerten zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ der approximativ nichtnegativen Matrixfaktorisierung von D sei bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ wie in Definition 3.19 gegeben. Für Parameter $\varepsilon_A \leq \tilde{\varepsilon}_A$ und $\varepsilon_C \leq \tilde{\varepsilon}_C$ gilt dann $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A} \subseteq \mathcal{M}_{\tilde{\varepsilon}_C, \tilde{\varepsilon}_A}$.

Beweis. Es wird gezeigt, dass ein Punkt $t \in \mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ auch in der Menge $\mathcal{M}_{\tilde{\varepsilon}_C, \tilde{\varepsilon}_A}$ enthalten ist. Da $t \in \mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ gilt, existiert eine reguläre Matrix $T \in \mathbb{R}^{s \times s}$, für die $T(1, 2 : s) = t^T$, $TV^T \geq -\varepsilon_A$, $TV^T w = e$ und $SU\Sigma T^{-1} \geq -\varepsilon_C$ gilt. Für diese Matrix T gilt offenbar auch $TV^T \geq -\tilde{\varepsilon}_A$ und $SU\Sigma T^{-1} \geq -\tilde{\varepsilon}_C$. Damit gilt nach Definition 3.14, dass auch $t \in \mathcal{M}_{\tilde{\varepsilon}_C, \tilde{\varepsilon}_A}$ erfüllt ist. \square

In Kapitel 4 wird die verallgemeinerte AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ für Matrizen vom Rang 3 weiter charakterisiert und ein Algorithmus zur geometrisch numerischen Konstruktion angegeben.

3.4 Fazit

In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass zur Beschreibung der Menge der nichtnegativen Rangfaktorisierungen $D = CA$ einer Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times s}$ vom Rang s die Menge der möglichen Zeilen des Faktors A betrachtet werden kann. Analog ließe sich die Theorie entsprechend für die Spalten von C entwickeln, dies ergibt sich, wenn statt der Faktorisierung von D die Faktorisierung $D^T = A^T C^T$ verwendet wird, vergleiche Bemerkung 3.3.

Aus der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} lassen sich zu einer gegebenen Zeile der Matrix A bis auf Skalierung alle weiteren möglichen Zeilen von A durch die Bedingungen des Satzes 3.15 ermitteln. Wird die verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ betrachtet, wird entsprechend der Satz 3.22 verwendet. Sind die Zeilen der skalierten Matrix A bekannt, können die Einträge der zugehörigen Matrix C entsprechend der Gleichungen (3.8) beziehungsweise (3.16) als Koeffizienten der Konvex- oder Affinkombination bestimmt werden. Alternativ kann C aber auch durch $C = U\Sigma T^{-1}$ berechnet werden. Die Menge der zulässigen Lösungen erlaubt es jedoch nicht die Faktoren C und A simultan zu bestimmen.

Für die $(s - 1)$ -dimensionale Darstellung der Menge der zulässigen Lösungen ist die Wahl der Skalierung entscheidend. Insbesondere kann bei der numerischen Berechnung der Menge der zulässigen Lösungen die Stabilität des Verfahrens von dieser Wahl abhängen. Um dies zu verdeutlichen wurden in Abschnitt 3.2.4 die RS- und FSV-Skalierungen an einem Modellbeispiel untersucht. Die RS-Skalierung hat den Vorteil, dass mit der Einheitskugel eine Obermenge bekannt ist, innerhalb derer die Menge der zulässigen Lösungen liegt. Neben der RS- und FSV-Skalierung existieren unendlich viele weitere Skalierungen, die im Einzelfall auf numerisch stabilere Berechnungen führen können.

Ein wesentliches Resultat dieses Kapitels ist die geometrische Beschreibung der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ für die approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierung entsprechend Satz 3.22. Dabei ist anzumerken, dass die zulässigen negativen Einträge in den Matrizen A und SC (vergleiche Definition 3.19) als absolute Werte gegeben sind. Die geometrische Beschreibung erlaubt es nicht relative Größen für die negativen Einträge vorzugeben und unter dieser Vorgabe die Menge der zulässigen Lösungen zu bestimmen.

Im folgenden Kapitel wird die Menge der zulässigen Lösungen für Rang-3-Matrizen näher betrachtet. Insbesondere wird mit dem *line-moving Algorithmus* ein geometrisches Verfahren zur Approximation der Menge $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ vorgestellt.

4 Geometrische Konstruktion der Menge zulässiger Lösungen für Rang-3-Matrizen

Die Ideen zur geometrischen Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} gehen auf Arbeiten von Borgen und Kowalski [14] sowie Borgen et al. [13] aus den 80er Jahren zurück. Die von ihnen vorgestellten Verfahren basieren auf einer Veröffentlichung von Lawton und Sylvestre von 1971 [41], die sich mit der nichtnegativen Faktorisierung von Matrizen vom Rang 2 zur Analyse spektraler Daten beschäftigt. Diese Arbeit gilt in der Chemometrie als Ausgangspunkt für die Entwicklung der Theorie zur multivariaten Rein-komponentenzerlegung [43].

In diesem Kapitel werden zunächst Algorithmen zur geometrischen Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} für Matrizen $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang 3 vorgestellt. Dabei wird auch die Frage beantwortet, ob zu einer gegebenen Matrix eine nichtnegative Rangfaktorisierung existiert. Die geometrischen Verfahren werden zudem für approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierungen erweitert, die etwa eingesetzt werden können, wenn aufgrund von Störungen keine nichtnegative Faktorisierung existiert. Numerische Beispiele ergänzen die Darstellungen.

Die Matrix D bezeichnet in diesem Kapitel eine Rang-3-Matrix. Ihre abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang 3 ist durch $D = U\Sigma V^T$ gegeben.

4.1 Konstruktion der Polygone INNPOL und FIRPOL

Grundlegend für die geometrische Konstruktion der Menge der zulässigen Lösung \mathcal{M} beziehungsweise $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ sind die Polygone INNPOL und FIRPOL, wie in den Sätzen 3.15 und 3.22 in Kapitel 3 dargestellt wurde. Das Polygon INNPOL ist durch die konvexe Hülle der niedrigdimensionalen Darstellung der Zeilen von D gegeben, vergleiche Definition 3.12. Die konvexe Hülle kann beispielsweise mittels des Quickhull Algorithmus bestimmt werden [7]. Dieser hat im zwei- und dreidimensionalen eine Laufzeit von $\mathcal{O}(\ell \log r)$, wobei ℓ die Anzahl der gegebenen Punkte und r die Anzahl der Eckpunkte der konvexen Hülle ist. Zur Bestimmung des Polygons INNPOL kann die Komplexität daher durch $\mathcal{O}(k \log k)$ nach oben abgeschätzt werden. Dabei bezeichnet k die Anzahl der Zeilen der Matrix D .

Das Polygon FIRPOL ist durch die Punkte gegeben, die das System von Ungleichung (3.15) erfüllen. Wenn die nichtnegative Matrixfaktorisierung betrachtet wird, wird in (3.15) $\varepsilon_C = 0$ gesetzt. Jede der komponentenweisen Ungleichungen beschreibt eine Halbebene und der Schnitt all dieser Halbebenen ergibt das äußere Polygon.

Zur Konstruktion von FIRPOL wird die Beschränktheit dieses Polygons verwendet (vergleiche [57] sowie Abschnitt 3.2.2). Ausgehend von einem Dreieck, das FIRPOL umschließt, wird das äußere Polygon berechnet. Zunächst wird das Startdreieck mit der ersten gegebenen Halbebene geschnitten. Ist der Schnitt leer, wird mit der nächsten Halbebene fortgefahren. Andernfalls wird die konvexe Schnittmenge bestimmt. So werden nacheinander alle Halbebenen durchlaufen. Die Punkte in der letzten Schnittmenge erfüllen dann alle gegebenen Ungleichungen und dies ist die maximale Menge mit dieser Eigenschaft. Die erhaltene Menge entspricht somit dem Polygon FIRPOL. Ein Beispiel zur Konstruktion

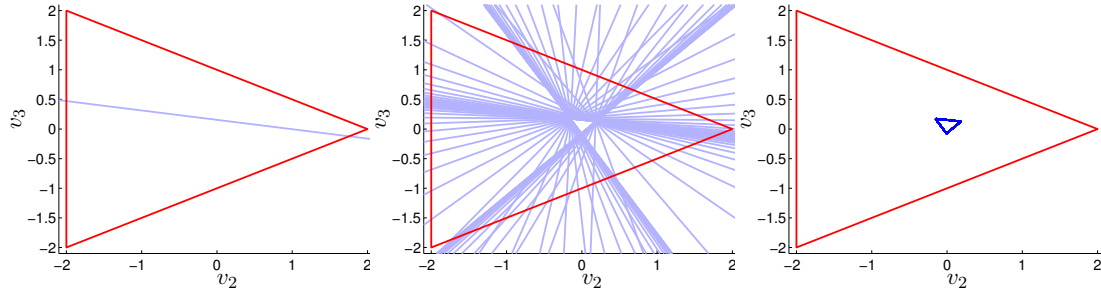


Abbildung 4.1: Konstruktion des Polygons FIRPOL ausgehend von einem beliebigen Dreieck, das FIRPOL umschließt. Links: Das umschließende Dreieck wird mit der Geraden zur ersten Halbebene aus dem Ungleichungssystem (3.15) geschnitten. Das untere Polygon, das durch den Schnitt entsteht, wird mit den Begrenzungsgeraden der weiteren Halbebenen geschnitten. Mitte: Es sind die Begrenzungsgeraden aller Halbebenen des Ungleichungssystems dargestellt. Links: Aus dem Schnitt aller Geraden ergibt sich das äußere Polygon FIRPOL (blau).

von FIRPOL ist in Abbildung 4.1 gegeben.

Die Komplexität der Konstruktion von FIRPOL ist durch $\mathcal{O}(n^2)$ nach oben beschränkt, wobei n die Anzahl der Ungleichungsbedingungen (und Spalten von D) ist.

Wird die RS-Skalierung verwendet, kann nach Lemma 3.10 das Ausgangsdreieck so gewählt werden, dass es den Einheitskreis enthält. Wird eine andere Skalierung verwendet, kann ein Dreieck, das den Einheitskreis enthält, aus der RS-Skalierung in die gewünschte Skalierung transformiert werden. Es ist aber auch möglich ein Dreieck so zu wählen, dass jede Ungleichungsbedingung durch mindestens einen Eckpunkt verletzt wird und durch einen anderen Eckpunkt erfüllt ist. In diesem Fall wird jede gegebene Halbebene das Dreieck schneiden und FIRPOL liegt daher innerhalb des Dreiecks. Ein entsprechendes Dreieck kann etwa aus einem Anfangsdreieck durch zentrische Streckung erzeugt werden, da der Nullpunkt nach Lemma 3.13 im Inneren des Polygons INNPOL und damit auch im Inneren von FIRPOL liegt.

Numerische Instabilitäten können auftreten, wenn Eckpunkte des aktuell betrachteten Polygons sehr nah an der Geraden liegen, die die aktuell betrachtete Halbebene begrenzt. Nur bis zum Bereich der Rechengenauigkeit kann sicher entschieden werden, ob ein Eckpunkt innerhalb oder außerhalb der Halbebene liegt.

Satz 3.15 erlaubt es nun, ausgehend von den Polygonen INNPOL und FIRPOL die Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} zu bestimmen.

4.2 Konstruktion der Menge der zulässigen \mathcal{M}

In diesem Abschnitt sollen drei geometrische Algorithmen vorgestellt werden. Der Algorithmus von Aggarwal ermöglicht es mittels geometrischer Konstruktionen zu entscheiden, ob eine nichtnegative Rangfaktorisierung zu einer Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang 3 existiert [3]. Wenn keine nichtnegative Rangfaktorisierung existiert, ist die Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} leer und es brauchen keine weiteren Konstruktionen durchgeführt zu werden. Andernfalls kann der Tangentalgorithmus genutzt werden, um die Menge zu konstruieren [14]. Dieser Algorithmus wurde von Borgen und Kowalski vorgeschlagen, ebenso wie der

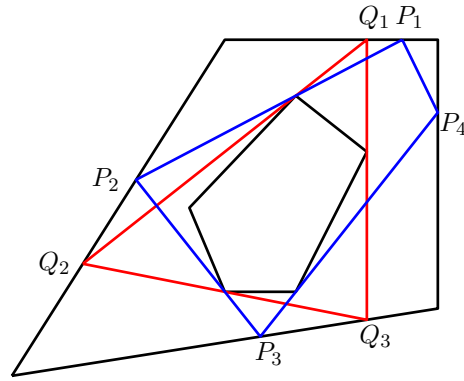


Abbildung 4.2: Darstellung zum Algorithmus von Aggarwal et al. Die Polygone INNPOL und FIRPOL sind schwarz dargestellt. Ausgehend vom Punkt P_1 wird das eingebettete Polygon $P_1P_2P_3P_4$ konstruiert. Ein eingebettetes Polygon mit minimaler Anzahl an Eckpunkten kann konstruiert werden, indem auf dem Polygonzug zwischen P_1 und P_2 ein geeigneter Startpunkt gesucht wird. Ein mögliches Polygon ist durch $Q_1Q_2Q_3$ gegeben.

Simplex-Rotations-Algorithmus. Letzter kann vor dem Tangentialgorithmus angewendet werden, um die Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen zu beschleunigen.

4.2.1 Der Algorithmus von Aggarwal

Aggarwal et al. stellen in der Arbeit [3] einen Algorithmus vor, um ein Polygon mit minimaler Anzahl an Eckpunkten zu bestimmen, das zwischen zwei gegebenen Polygonen eingebettet ist. Wenn das innere und äußere Polygon den Polygonen INNPOL und FIRPOL zur Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ entsprechen, ist die minimale Anzahl an Eckpunkten eines eingebetteten Polygons nach Lemma 3.2 gleich dem nichtnegativen Rang der Matrix D . In Lemma 3.2 wird die Kegeldarstellung zur Beschreibung der nichtnegativen Matrixfaktorisierungen genutzt. Durch den Schnitt mit einer Skalierungsebene ergibt sich für Matrizen vom Rang 3 gerade die Situation der eingebetteten Polygone.

Der Algorithmus von Aggarwal nutzt ebenso wie der Tangenten- und der Simplex-Rotations-Algorithmus die Konstruktion von Tangenten an das innere Polygon INNPOL.

Definition 4.1 (Tangente an ein Polygon). *Jede Gerade, die ein konvexes Polygon in mindestens einem Punkt berührt, das Innere des Polygons aber nicht schneidet, wird als Tangente an das Polygon bezeichnet. In den Eckpunkten des Polygons treten folglich Scharen von Tangenten auf.*

Der Algorithmus von Aggarwal et al. bestimmt zunächst eine obere Schranke für den nichtnegativen Rang der Matrix D . Ausgehend von einem Punkt P_1 auf dem Rand von FIRPOL wird in mathematisch positiver Richtung die Tangente an INNPOL konstruiert. Von dem Schnittpunkt P_2 der Tangente mit FIRPOL wird erneut die Tangente an INNPOL in positiver Richtung betrachtet. Die Konstruktion wird wiederholt, bis die aktuell betrachtete Tangente die Ausgangstangente im Inneren von FIRPOL oder auf dem Rand von FIRPOL schneidet. Wird nun der zuletzt betrachtete Punkt mit dem Startpunkt P_1

verbunden, erhält man ein eingebettetes Polygon. Dieses Polygon hat maximal einen Eckpunkt mehr als ein eingebettetes Polygon mit minimaler Anzahl an Eckpunkten [3]. Dies kann wie folgt gezeigt werden: Die Anzahl der Eckpunkte des konstruierten Polygons sei $\ell + 1$. Dann gilt für jede der ℓ Tangenten, dass mindestens ein Eckpunkt eines eingebetteten Polygons auf jeder Seite der Tangente liegen muss. Andernfalls kann das innere Polygon nicht umschlossen werden. Es können somit nur eingebettete Polygone mit mindestens ℓ Eckpunkten auftreten.

Nun soll ein eingebettetes Polygon mit minimaler Anzahl an Eckpunkten konstruiert werden. Da auf jeder Seite einer Tangente an INNPOL ein Eckpunkt des eingebetteten Polygons liegen muss, liegt ein Eckpunkt Q_1 des minimalen eingebetteten Polygons auf dem Polygonzug P_1P_2 . Der Punkt Q_1 kann bestimmt werden, indem der Polygonzug P_1P_2 ausgehend von P_1 durchlaufen wird und die oben beschriebene Tangentenkonstruktion durchgeführt wird. Dabei sind insbesondere die Situationen zu beachten,

- wenn in der Konstruktion eine Tangente an INNPOL eine Seite von INNPOL enthält und
- wenn eine Tangente an INNPOL das Polygon FIRPOL in einem Eckpunkt schneidet [3].

Um den nichtnegativen Rang von D zu bestimmen, wird ausgehend von den Punkten auf dem Polygonzug P_1P_2 die Tangentenkonstruktion durchgeführt, für die mindestens eine der Tangenten in einer der oben beschriebenen Positionen ist. Die minimale Anzahl an Eckpunkten der so erhaltenen Polygone gibt dann den nichtnegativen Rang von D an. Ein Beispiel für den Übergang eines eingebetteten Vierecks zu einem Dreieck ist in Abbildung 4.2 dargestellt.

Die Laufzeit des Algorithmus hängt polynomiell von der Anzahl der Eckpunkte von INNPOL und FIRPOL, sowie ℓ ab. Eine obere Schranke für ℓ ist durch die Anzahl der Eckpunkte von FIRPOL gegeben. Damit ist die Entscheidungsfrage, ob zu einer nichtnegativen Matrix D vom Rang 3 eine nichtnegative Rangfaktorisierung existiert, der Komplexitätsklasse P zugeordnet.

Nachdem die Frage, ob zur Matrix D eine nichtnegative Rangfaktorisierung existiert, durch den Algorithmus von Aggarwal beantwortet wurde, soll nun die Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} mittels des Tangentalgorithmus konstruiert werden.

4.2.2 Der Tangentalgorithmus

Ausgehend von den Polygonen INNPOL und FIRPOL wird im Tangentalgorithmus der Rand der Menge der zulässigen Lösungen bestimmt. Dazu werden Tangenten um das innere Polygon rotiert und ausgehend von ihren Schnittpunkten mit FIRPOL Dreiecke konstruiert, die INNPOL umschließen [14].

Eine Veranschaulichung zu dem Algorithmus ist in Abbildung 4.3 gegeben. Die Schnittpunkte der Tangente r an INNPOL mit dem Polygon FIRPOL sind mit P und Q bezeichnet. Von diesen Punkten werden die weiteren Tangenten p und q an INNPOL bestimmt. Der Schnittpunkt von p und q ist R . Liegt R innerhalb des äußeren Polygons oder auf dessen Rand, und schließt das Dreieck PQR das innere Polygon ein, so gehört R zum Rand der AFS. Weiter gehört das konvexe Polygon, das von den Geraden p und q sowie dem Rand von FIRPOL begrenzt wird, zur Menge der zulässigen Lösungen [14]. Die Tangente r wird nun unter einem vorgegebenen Diskretisierungswinkel um das innere Polygon rotiert und die Rechnungen werden wiederholt. Der Algorithmus endet, wenn die Tangente r INNPOL einmal umrundet hat.

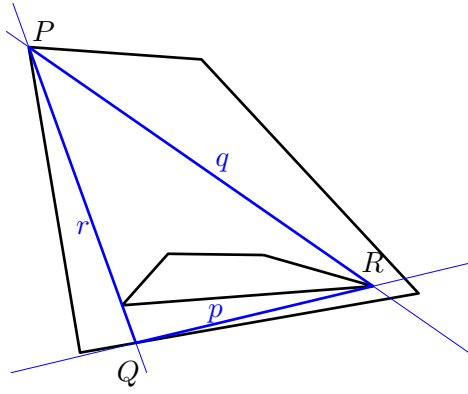


Abbildung 4.3: Konstruktionsbeispiel im Tangentialalgorithmus.

Der Tangentialalgorithmus liefert Punkte R des inneren Rands der Menge der zulässigen Lösungen, vergleiche Definition 3.18. Dies kann wie folgt gezeigt werden: Wenn R zur Menge der zulässigen Lösungen gehört, dann existiert nach Satz 3.15 ein Dreieck PQR , das in FIRPOL liegt und INNPOL umschließt. Nach Konstruktion von R mittels des Tangentialalgorithmus existiert genau ein solches Dreieck. Die Punkte P und Q ergeben sich als Schnittpunkte der Tangenten an INNPOL, die durch R verlaufen. Für ein Punkt R' im Inneren von PQR schneidet mindestens eine der Geraden PR' oder QR' das innere Polygon. Folglich kann R' nicht zur Menge der zulässigen Lösungen gehören und R ist innerer Randpunkt der AFS.

Zwischen den mittels des Tangentialalgorithmus ermittelten Punkten der AFS wird linear approximiert. Der innere Rand kann aufgrund der benötigten Diskretisierung daher nicht exakt bestimmt werden. Der äußere Rand der AFS ist durch den Rand von FIRPOL gegeben. In der Menge der zulässigen Lösungen können Punkte existieren, die gleichzeitig zum inneren und äußeren Rand der AFS gehören. Dies geschieht, wenn mit dem Tangentialalgorithmus ein Punkt R konstruiert wird, der auf dem Rand von FIRPOL liegt. In Sonderfällen können zudem Randpunkte der Menge der zulässigen Lösungen existieren, die weder zum inneren, noch zum äußeren Rand gehören. Dies geschieht beispielsweise, wenn Punkte von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL liegen. Ein Beispiel ist in Abbildung 4.4 gegeben.

Der Aufwand zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen kann mit $\mathcal{O}(\omega kn)$ abgeschätzt werden. Dabei bezeichnet ω die Anzahl der durchgeführten Dreieckskonstruktionen im Algorithmus (diese hängt vom Diskretisierungswinkel ab), die Anzahl der Eckpunkte von INNPOL ist nach oben durch k beschränkt (dies entspricht der Anzahl der Zeilen von D) und die Anzahl der Eckpunkte von FIRPOL ist maximal n (dies entspricht der Anzahl der Spalten von D). Die Abschätzung ergibt sich, da für jede Tangente an INNPOL die Schnittpunkte P und Q mit FIRPOL bestimmt werden und dazu die Kanten des äußeren Polygons durchlaufen werden. Ausgehend von den Punkten P und Q werden nun die weiteren Tangenten an INNPOL bestimmt, dazu werden die Eckpunkte von INNPOL durchlaufen.

Bei der Implementierung des Tangentialalgorithmus ist die Situation, wenn Punkte von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL liegen, besonders zu betrachten. Es kann in diesem Fall numerisch nicht sicher entschieden werden, ob ein Punkt auf einer Kante liegt. Für die Punkte von INNPOL werden die Abstände zu den Kanten von FIRPOL bestimmt. Liegt einer dieser Abstände unter einer vorgegebenen Grenze (etwa $1.0 \cdot 10^{-14}$), wird angenom-

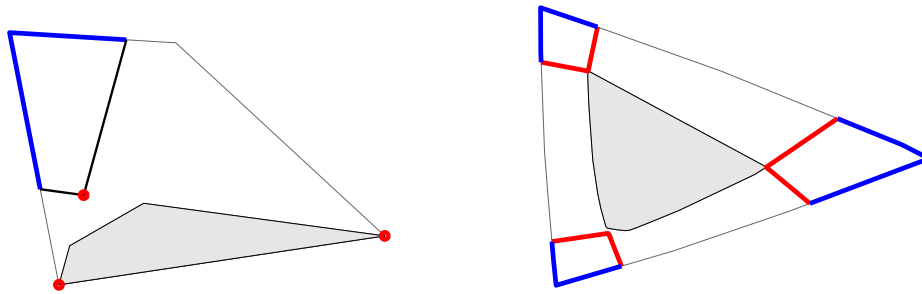


Abbildung 4.4: Darstellung von Beispielen für den inneren und äußeren Rand der Menge der zulässigen Lösungen. Links: Eine Seite von INNPOL liegt auf dem Rand von FIRPOL. Die roten Punkte gehören zum inneren Rand der AFS. Der blaue Polygonzug sowie die roten Punkte auf dem Rand von FIRPOL gehören zum äußeren Rand. Die schwarzen Linien zwischen dem inneren roten Punkt und dem blauen Randstück gehören weder zum inneren, noch zum äußeren Rand. Rechts: Der innere Rand der AFS ist rot und der äußere Rand ist blau gekennzeichnet.

men, dass dieser Punkt auf einer Kante von FIRPOL liegt. Es ist auch möglich, dass die Abstände zu zwei Kanten unter der kritischen Grenze liegen. Dann wird der Punkt als Eckpunkt von FIRPOL zwischen diesen Kanten betrachtet. Liegt der Punkt P auf einer Kante des äußeren Polygons, so werden als Tangenten an INNPOL in diesem Punkt nur die Strecken zugelassen, die durch P und einen weiteren Punkt von FIRPOL, der nicht auf derselben Kante wie P liegt, begrenzt sind oder als Tangente wird die entsprechende Kante von FIRPOL gewählt. Liegen zwei Eckpunkte des inneren Polygons auf derselben Kante von FIRPOL, so wird nur diese Kante als Tangente an INNPOL in diesen Punkten zugelassen. Wenn Punkte von INNPOL auf dem Rand des äußeren Polygons liegen, kann die Menge der zulässigen Lösungen aus Segmenten bestehen, die durch einen Punkt oder eine Linie gegeben sind. Diese Fälle werden in Kapitel 7 näher betrachtet.

Neben dem Tangentialalgorithmus schlugen Borgen und Kowalski in [14] ein Verfahren vor, um die Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen zu beschleunigen. Der sogenannte Simplex-Rotations-Algorithmus wird im Folgenden betrachtet.

4.2.3 Der Simplex-Rotations-Algorithmus

Der Simplex-Rotations-Algorithmus [14] kann verwendet werden, um den Bereich des Rands von FIRPOL einzuschränken, von welchem aus Tangenten an INNPOL, entsprechend des Tangenten-Algorithmus, konstruiert werden. Ausgehend von einem Punkt P auf dem Rand von FIRPOL wird die Tangente an INNPOL in positiver Richtung bestimmt. Ihr Schnitt mit dem Rand von FIRPOL sei Q . Nun wird ausgehend von Q wieder die Tangente an INNPOL in positiver Richtung ermittelt und ihr Schnittpunkt mit dem Rand des äußeren Polygons sei R . Abschließend wird die Tangente von R an INNPOL in positiver Richtung betrachtet. Diese schneide den Rand von FIRPOL im Punkt W . Wenn die Gerade PQ die Gerade RW schneidet, gehört der Polygonzug auf dem Rand von FIRPOL, der zwischen P und W liegt, zur Menge der zulässigen Lösungen. Da P zur AFS gehört, kann dieselbe Konstruktion mit Tangenten an INNPOL in negativer Richtung wiederholt wer-

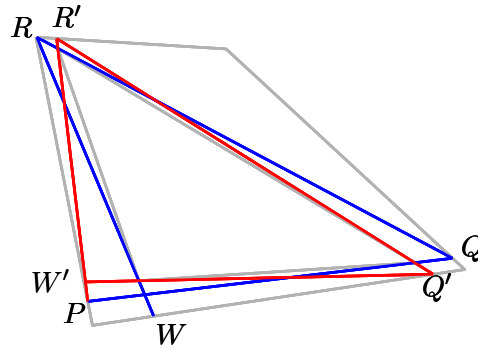


Abbildung 4.5: Darstellung zum Simplex-Rotations-Algorithmus. Ausgehend von dem Punkt P wird in positiver Richtung eine Folge von drei Tangenten an INNPOL konstruiert, indem der Schnittpunkt einer Tangenten an INNPOL Ausgangspunkt für eine weitere Tangente ist (blaue Strecken). Es ergeben sich die Punkte Q , R und W als Schnittpunkte mit dem äußeren Polygon FIRPOL. Da sich PQ und RW schneiden, gehört P zur Menge der zulässigen Lösungen. Die Folge von Tangenten, die ausgehend von P an INNPOL in negativer Richtung konstruiert werden (rote Strecken), ergeben die Punkte R' , Q' und W' . Der Polygonzug auf dem Rand von FIRPOL, der von W nach W' verläuft und P enthält, gehört zur AFS. Die Konstruktion kann ausgehend von W beziehungsweise W' wiederholt werden.

den. Die so erhaltenen Punkte seien in entsprechender Reihenfolge R' , Q' und W' . Dann gehört der Polygonzug auf dem Rand von FIRPOL, der zwischen W und W' liegt und der P enthält, zur AFS. Ebenso gehören die Polygonzüge auf dem Rand von FIRPOL, die zwischen Q und Q' sowie zwischen R und R' liegen und jeweils den Punkt P nicht enthalten, zur Menge der zulässigen Lösungen.

Ausgehend von den Punkten W und W' können wiederum die Tangenten in negativer beziehungsweise positiver Richtung an INNPOL konstruiert werden. Bei einem wiederholten Vorgehen konvergieren die so erhaltenen Punkte W und W' gegen Punkte auf dem Rand von FIRPOL, die zur Menge der zulässigen Lösungen gehört, in deren Umgebung aber Randpunkte von FIRPOL existieren, die nicht zur AFS gehören. Dabei wird vorausgesetzt, dass nicht alle Randpunkte von FIRPOL zur Menge der zulässigen Lösungen gehören. Ein Beispiel für die Konstruktion der Punkte W und W' ist in Abbildung 4.4 gegeben.

Der Simplex-Rotations-Algorithmus kann auch von einem Punkt P auf dem Rand von FIRPOL begonnen werden, der nicht zur AFS gehört. Dann schneiden sich die Strecken PQ und RW nicht. Bei wiederholter Konstruktion der Tangenten an INNPOL konvergiert der Algorithmus gegen einen Punkt, der zur AFS gehört und in dessen Umgebung Randpunkte von FIRPOL liegen, die nicht zur AFS gehören.

Der Simplex-Rotations-Algorithmus wurde zur Berechnung der AFS in den Beispielen in dieser Arbeit nicht verwendet. Dies hat zwei Gründe: Wenn die AFS nur aus einer Zusammenhangskomponente besteht, liefert er keine Einschränkung des Lösungsbereiches und der Tangentialgorithmus muss für den ganzen Bereich angewendet werden. Weiter kann die AFS aus mehr als drei Zusammenhangskomponenten bestehen, wie in Kapitel

7 gezeigt wird. Da der Simplex-Rotations-Algorithmus, ausgehend von einem Punkt der AFS, jedoch nur drei Segmente liefert, wird in diesen Fällen nicht die vollständige Menge der zulässigen Lösungen erfasst.

4.3 Konstruktion der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$

Der line-moving Algorithmus ist eine Verallgemeinerung des Tangentialalgorithmus. Er kann eingesetzt werden, um die verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ zu bestimmen. Während im Tangentialalgorithmus Tangenten an das innere Polygon betrachtet werden, werden im line-moving Algorithmus Scharen von Geraden betrachtet, die INNPOL auch schneiden können. Zunächst werden die mathematischen Hintergründe angegeben. Anschließend wird der Algorithmus beschrieben. Die in diesem Abschnitt dargestellten Ergebnisse wurden in [34] veröffentlicht.

4.3.1 Mathematischer Hintergrund

Der line-moving Algorithmus basiert auf Satz 3.22. Für Matrizen D vom Rang 3 besagt dieser, dass ein Punkt zur Menge zulässiger Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ gehört, wenn er innerhalb von FIRPOL liegt und innerhalb von FIRPOL zwei weitere Punkte existieren, sodass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen dieser Punkte sind und die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind. Mit dem Tangentialalgorithmus kann die AFS konstruiert werden, wenn $\varepsilon_C = 0$ gilt. Dann werden Dreiecke konstruiert, die INNPOL umschließen und von denen zwei Eckpunkte auf dem Rand von FIRPOL liegen. Für den Fall $\varepsilon_C > 0$ sollen nun Dreiecke PQR in FIRPOL konstruiert werden, sodass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombination von P , Q und R sind und die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind. Es ist auch in diesem Fall möglich zwei Eckpunkte des Dreiecks PQR auf dem Rand von FIRPOL zu wählen. Dies wird im Folgenden bewiesen.

Lemma 4.2. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang 3. INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.12 und 3.20 beschrieben, die zu D gehörenden Polygone bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Für den Parameter ε_A von FIRPOL gelte $SD \geq -\varepsilon_A$, sodass INNPOL in FIRPOL enthalten ist.*

Zu jedem Punkt R der AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ existieren zwei Punkte P und Q im Inneren oder auf dem Rand von FIRPOL, sodass alle Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P , Q und R sind. Die Entwicklungskoeffizienten in den Affinkombinationen sind dabei größer oder gleich $-\varepsilon_C$. Es ist möglich mindestens einen der Punkte P und Q so zu wählen, dass er auf dem Rand von FIRPOL liegt.

Beweis. Die Eckpunkte von INNPOL seien mit \mathcal{I}_i mit $i \leq 1 \leq k$ bezeichnet. Für jeden Eckpunkt \mathcal{I}_i gilt nach Satz 3.22, dass er als Affinkombinationen von R und zwei Punkten P' und Q'

$$\mathcal{I}_i = \alpha_i P' + \beta_i Q' + \gamma_i R \quad (4.1)$$

darstellbar ist. Für die Entwicklungskoeffizienten gilt dabei $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i \geq -\varepsilon_C$ und $\alpha_i + \beta_i + \gamma_i = 1$. Nun wird angenommen, dass sowohl P' als auch Q' im Inneren von FIRPOL liegen. Der Punkt P' sei eine Konvexkombination von R und einem Punkt P .

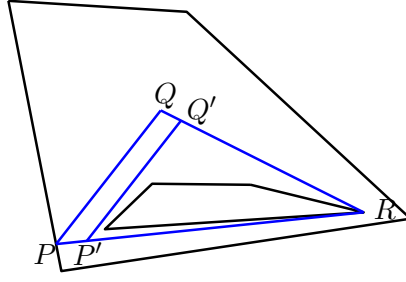


Abbildung 4.6: Veranschaulichung der Beweisidee von Lemma 4.2. Zu jedem Punkt R innerhalb der AFS existieren zwei Punkte P' und Q' , sodass Die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P' , Q' und R' sind und die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind. Durch eine Streckung kann aus $P'Q'R$ das Dreieck PQR erzeugt werden, von dem mindestens einer der Eckpunkte P oder Q auf dem Rand von FIRPOL liegt.

Ebenso sei Q' eine Konvexkombination von R und einem Punkt Q . Eine grafische Veranschaulichung ist in Abbildung 4.6 gegeben. Für die Punkte P' und Q' gelte

$$\begin{aligned} P' &= \lambda P + (1 - \lambda)R \\ Q' &= \lambda Q + (1 - \lambda)R \end{aligned}$$

mit einer Konstanten $\lambda \in [0, 1]$. Aus der Gleichung (4.1) folgt nun

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_i &= \alpha_i(\lambda P + (1 - \lambda)R) + \beta_i(\lambda Q + (1 - \lambda)R) + \gamma_i R \\ &= \alpha_i \lambda P + \beta_i \lambda Q + (\alpha_i(1 - \lambda) + \beta_i(1 - \lambda) + \gamma_i)R. \end{aligned}$$

Die Summe der Entwicklungskoeffizienten in dieser Darstellung von \mathcal{I}_i gilt

$$\alpha_i \lambda + \beta_i \lambda + \alpha_i(1 - \lambda) + \beta_i(1 - \lambda) + \gamma_i = \alpha_i + \beta_i + \gamma_i = 1.$$

Somit ist \mathcal{I}_i eine Affinkombination der Punkte P , Q und R . Weiter gilt für die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_i \lambda \geq -\varepsilon_C$, $\beta_i \lambda \geq -\varepsilon_C$ und

$$\begin{aligned} \alpha_i(1 - \lambda) + \beta_i(1 - \lambda) + \gamma_i &= \underbrace{\alpha_i + \beta_i + \gamma_i}_{=1} - \lambda \underbrace{(\alpha_i + \beta_i)}_{=1 - \gamma_i} \\ &= 1 - \lambda + \lambda \gamma_i \geq \lambda \gamma_i \geq -\varepsilon_C. \end{aligned}$$

Dies zeigt, dass \mathcal{I}_i auch eine zulässige Affinkombination der Punkte P , Q und R mit Entwicklungskoeffizienten größer oder gleich $-\varepsilon_C$ ist.

Geometrisch entspricht die Konstruktion einer Streckung des Dreiecks $P'Q'R$. Die Dreiecke $P'Q'R$ und PQR sind ähnlich zueinander. Das Dreieck $P'Q'R$ kann daher an dem Zentrum R gestreckt werden, bis (mindestens) ein Eckpunkt auf dem Rand von FIRPOL liegt. Dies beweist das Lemma. \square

Nun wird gezeigt, dass sowohl der Punkt P als auch der Punkt Q auf dem Rand von FIRPOL gewählt werden kann.

Satz 4.3. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang 3. INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.12 und 3.20 beschrieben, die zu D gehörenden Polygone bezüglich der*

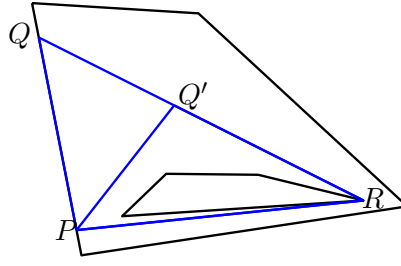


Abbildung 4.7: Veranschaulichung zu Satz 4.3. Zu jedem Punkt R der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ existieren zwei Punkte P und Q im Inneren oder auf dem Rand von FIRPOL, sodass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P , Q und R sind und die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind. Die Punkte P und Q können beide auf dem Rand von FIRPOL gewählt werden.

Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Für den Parameter ε_A von FIRPOL gelte $SD \geq -\varepsilon_A$, sodass INNPOL in FIRPOL enthalten ist.

Zu jedem Punkt R der AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ existieren zwei Punkte P und Q auf dem Rand von FIRPOL, sodass alle Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P , Q und R sind und die Entwicklungskoeffizienten in den Affinkombinationen sind größer oder gleich $-\varepsilon_C$.

Beweis. Aus Lemma 4.2 folgt, dass zu jedem Punkt R der AFS zwei Punkte P und Q' existieren, sodass mindestens einer der Punkte, dies sei P , auf dem Rand von FIRPOL liegt und jeder Eckpunkt von INNPOL eine zulässige Affinkombination von P , Q' und R ist. Angenommen Q' liegt nicht auf dem Rand von FIRPOL. Dann schneidet ein Strahl, der von R ausgeht und durch Q' verläuft, das äußere Polygon in dem Punkt Q , vergleiche Abbildung 4.7. Der Punkt Q' ist eine Konvexkombination von Q und R , also gilt

$$Q' = \lambda Q + (1 - \lambda)R$$

mit $0 < \lambda < 1$. Für jeden Eckpunkt \mathcal{I}_i , $1 \leq i \leq k$ von INNPOL gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_i &= \alpha_i P + \beta_i Q' + \gamma_i R \\ &= \alpha_i P + \beta_i (\lambda Q + (1 - \lambda)R) + \gamma_i R \\ &= \alpha_i P + \beta_i \lambda Q + (\gamma_i + \beta_i (1 - \lambda))R \end{aligned}$$

mit $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i \geq -\varepsilon_C$ und $\alpha_i + \beta_i + \gamma_i = 1$.

Angenommen es gilt $\gamma_i + \beta_i(1 - \lambda) < -\varepsilon_C$ und der Koeffizient vor R ist kleiner als $-\varepsilon_C$. Dann müssen sowohl γ_i als auch β_i negativ sein, da sie jeweils durch $-\varepsilon_C$ nach unten beschränkt sind. Das bedeutet, dass \mathcal{I}_i in der Halbebene liegt, die auf der anderen Seite der Geraden PQ' ist als der Punkt R . Gleichzeitig muss \mathcal{I}_i auf der anderen Seite der Gerade PR liegen als Q' . Da P auf dem Rand von FIRPOL liegt, folgt, dass \mathcal{I}_i außerhalb von FIRPOL ist. Dies ist ein Widerspruch, da FIRPOL das Polygon INNPOL enthält. Somit muss $\gamma_i + \beta_i(1 - \lambda) \geq -\varepsilon_C$ gelten. Damit sind alle Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P , Q und R und die Entwicklungskoeffizienten in den Affinkombinationen sind größer oder gleich $-\varepsilon_C$. \square

Dieser Satz zeigt, alle Punkte der Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ jeweils ausgehend von zwei Punkten auf dem Rand von FIRPOL konstruiert werden können. Der

Tangentenalgorithmus liefert, ausgehend von zwei Punkten auf dem Rand von FIRPOL, einen Punkt des inneren Rands der AFS \mathcal{M} (vorausgesetzt die Konstruktion führt zu einem Punkt im Inneren von FIRPOL). Mit dem line-moving Algorithmus sollen ebenfalls Punkte auf dem inneren Rand der AFS approximiert werden.

Lemma 4.4. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang 3. INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.12 und 3.20 beschrieben, die zu D gehörenden Polygone bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Für den Parameter ε_A von FIRPOL gelte $SD \geq -\varepsilon_A$, sodass INNPOL in FIRPOL enthalten ist.*

Es sei R ein Punkt auf dem inneren Rand von $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ und die Punkte P und Q seien auf dem Rand von FIRPOL, sodass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P , Q und R mit Entwicklungskoeffizienten größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind. Dann gilt für mindestens einen Eckpunkt von INNPOL, dass mindestens einer der Entwicklungskoeffizienten in der Affinkombination dieses Eckpunkts gleich $-\varepsilon_C$ ist.

Beweis. Die Eckpunkte von INNPOL seien durch \mathcal{I}_i mit $1 \leq i \leq k$ gegeben. Sie können als Affinkombination der Punkte P , Q und R in der Form

$$\mathcal{I}_i = \alpha_i P + \beta_i Q + \gamma_i R,$$

geschrieben werden. Dabei gilt $\alpha_i + \beta_i + \gamma_i = 1$ und $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i \geq -\varepsilon_C$.

Angenommen die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ zu allen Eckpunkten \mathcal{I}_i von INNPOL erfüllen die strikten Ungleichungen $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i > -\varepsilon_C$. Es sei R' eine Konvexkombination von P , Q und R , sodass

$$R' = \lambda P + \lambda Q + (1 - 2\lambda)R,$$

mit $0 < \lambda < 0.5$ gilt. Dann kann R dargestellt werden als

$$R = \frac{R' - \lambda P - \lambda Q}{1 - 2\lambda}. \quad (4.2)$$

Die Eckpunkte \mathcal{I}_i von INNPOL können nun als Affinkombinationen von P , Q und R' in der Form

$$\mathcal{I}_i = \left(\alpha_i - \frac{\lambda \gamma_i}{1 - 2\lambda} \right) P + \left(\beta_i - \frac{\lambda \gamma_i}{1 - 2\lambda} \right) Q + \frac{\gamma_i}{1 - 2\lambda} R'$$

geschrieben werden. Es soll nun ein Parameter λ_0 so gewählt werden, dass für die Entwicklungskoeffizienten die Ungleichungen

$$\alpha_i - \frac{\lambda_0 \gamma_i}{1 - 2\lambda_0} \geq -\varepsilon_C \quad (4.3)$$

$$\beta_i - \frac{\lambda_0 \gamma_i}{1 - 2\lambda_0} \geq -\varepsilon_C \quad (4.4)$$

$$\frac{\gamma_i}{1 - 2\lambda_0} \geq -\varepsilon_0 \quad (4.5)$$

gelten und mindestens eine der Ungleichungen strikt erfüllt ist.

Es werden die drei Fälle $\gamma_i > 0$, $\gamma_i < 0$ und $\gamma_i = 0$ unterschieden. Wenn $\gamma_i > 0$ gilt, wird in den Ungleichungen (4.3) und (4.4) ein positiver Wert von α_i beziehungsweise β_i abgezogen. Dies erlaubt eine Gleichheit in einer der Ungleichungen zu erreichen, wenn λ_0 hinreichend groß gewählt wird. In dem Fall $\gamma_i < 0$ wird für ein hinreichend großes λ_0 die Ungleichung (4.5) strikt erfüllt, da $\gamma_i > -\varepsilon_C$ gilt. In dem letzten Fall $\gamma_i = 0$ liegt der

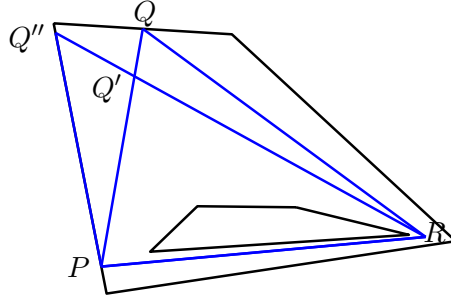


Abbildung 4.8: Darstellung zum 1. Fall des Beweises von Satz 4.5.

Eckpunkt \mathcal{I}_i auf der Strecke PQ . Gilt dies für alle Eckpunkte von INNPOL, folgt dass das innere Polygon auf der Geraden durch P und Q liegt und zu einer Strecke entartet ist. Der Rang der Ausgangsmatrix D ist in diesem Fall kleiner als 3.

Damit folgt, dass R' zur verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen gehört und dass R kein innerer Randpunkt von $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ sein kann, vergleiche Definition 3.24. \square

Das Lemma wird in dem nachfolgenden Satz verstärkt. Für einen inneren Randpunkt wird nicht nur für einen Entwicklungskoeffizient bezüglich eines Eckpunkts von INNPOL der Wert $-\varepsilon_C$ angenommen, sondern für mindestens zwei Koeffizienten, die aber unterschiedlichen Eckpunkten von INNPOL zugeordnet sein können.

Satz 4.5. *Es sei $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine Matrix vom Rang 3. INNPOL und FIRPOL sind, wie in den Definitionen 3.12 und 3.20 beschrieben, die zu D gehörenden Polygone bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$. Für den Parameter ε_A von FIRPOL gelte $SD \geq \varepsilon_A$, sodass INNPOL in FIRPOL enthalten ist.*

Sei R ein Punkt auf dem inneren Rand von $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ und seien P und Q Punkte auf dem Rand von FIRPOL, sodass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P , Q und R mit Entwicklungskoeffizienten größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind. Dann existiert für mindestens zwei der Punkte P , Q und R mindestens ein Eckpunkt von INNPOL, sodass in der Affindarstellung dieses Eckpunktes der zugehörige Entwicklungskoeffizient gleich $-\varepsilon_C$ ist.

Beweis. Die Eckpunkte von INNPOL seien durch \mathcal{I}_i mit $1 \leq i \leq k$ gegeben. Sie können als Affinkombination der Punkte P , Q und R in der Form

$$\mathcal{I}_i = \alpha_i P + \beta_i Q + \gamma_i R \quad (4.6)$$

geschrieben werden. Dabei gilt $\alpha_i + \beta_i + \gamma_i = 1$ und $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i \geq -\varepsilon_C$.

Im Folgenden wird angenommen, dass für zwei der drei Punkte P , Q und R alle Entwicklungskoeffizienten echt größer als $-\varepsilon_C$ sind. Jeder dieser Fälle wird zu einem Widerspruch geführt, was schließlich die Behauptung beweist.

1. Fall: Angenommen die Entwicklungskoeffizienten von P und Q sind für jeden Eckpunkt von INNPOL strikt größer als $-\varepsilon_C$, das heißt es gilt $\alpha_i > -\varepsilon_C$ und $\beta_i > -\varepsilon_C$ für jeden Eckpunkt \mathcal{I}_i von INNPOL. Sei Q' eine Konvexkombination von P und Q , die durch

$$Q' = \lambda P + (1 - \lambda)Q$$

mit $0 < \lambda < 1$ gegeben ist. Der Punkt Q kann dann als $Q = (Q' - \lambda P)/(1 - \lambda)$ geschrieben werden.

Wird dies in die Darstellung von \mathcal{I}_i in Gleichung (4.6) eingesetzt, ergibt sich

$$\mathcal{I}_i = \underbrace{\left(\alpha_i - \frac{\lambda\beta_i}{1-\lambda}\right)}_{\bar{\alpha}_i} P + \underbrace{\frac{\beta_i}{1-\lambda}}_{\bar{\beta}_i} Q' + \gamma_i R.$$

Nun kann ein Parameter $0 < \lambda_0 < 1$ hinreichend klein gewählt werden, sodass die Koeffizienten $\bar{\alpha}_i = \alpha_i - (\lambda_0\beta_i)/(1 - \lambda_0)$ und $\bar{\beta}_i = \beta_i/(1 - \lambda_0)$ für alle Indizes i größer als $-\varepsilon_C$ sind. Dann sei Q'' der Schnittpunkt des Rands von FIRPOL mit dem Strahl, der von R ausgeht und durch Q' verläuft. Eine grafische Veranschaulichung ist in Abbildung 4.8 gegeben. Nun kann Q' als Konvexkombination von Q'' und R in der Form

$$Q' = \mu Q'' + (1 - \mu)R$$

mit einem Parameter $0 < \mu < 1$ dargestellt werden. Die Eckpunkte von INNPOL können folglich als

$$\mathcal{I}_i = \bar{\alpha}_i P + \mu \bar{\beta}_i Q'' + (\gamma_i + (1 - \mu)\bar{\beta}_i)R$$

geschrieben werden. Die Koeffizienten $\bar{\alpha}_i$ und $\mu \bar{\beta}_i$ sind strikt größer als $-\varepsilon_C$. Angenommen es würde $\gamma_i + (1 - \mu)\bar{\beta}_i < -\varepsilon_C$ gelten, dann müssten sowohl $\bar{\beta}_i$ als auch γ_i negativ sein. Dies steht jedoch im Widerspruch dazu, dass P auf dem Rand von FIRPOL liegt. Da $\bar{\beta}_i$ und γ_i nicht gleichzeitig negativ sein können, ist die Gleichung $\gamma_i + (1 - \mu)\bar{\beta}_i = -\varepsilon_C$ genau dann erfüllt, wenn $\gamma_i = -\varepsilon_C$ und $\bar{\beta}_i = 0$ gilt. Dies würde aber bedeuten, dass der Punkt \mathcal{I}_i außerhalb von FIRPOL liegt, was ebenfalls zum Widerspruch führt. Daher müssen alle Entwicklungskoeffizienten strikt größer als $-\varepsilon_C$ sein. Dann folgt aus Lemma 4.4, dass R nicht auf dem inneren Rand der AFS liegen kann. Daher kann die Annahme $\alpha_i > -\varepsilon_C$ und $\beta_i > -\varepsilon_C$ nicht für alle Eckpunkte \mathcal{I}_i von INNPOL erfüllt sein.

2. Fall: Nun wird angenommen, dass $\alpha_i > -\varepsilon_C$ und $\gamma_i > -\varepsilon_C$ für alle Eckpunkte \mathcal{I}_i von INNPOL gilt. Der Punkt R' sei eine Konvexkombination von P und R

$$R' = \lambda P + (1 - \lambda)R$$

mit $0 < \lambda < 1$. Dann ist R durch $R = (R' - \lambda P)/(1 - \lambda)$ gegeben. Nun können die Eckpunkte von INNPOL \mathcal{I}_i als Affinkombination von P , Q und R' in der Form

$$\mathcal{I}_i = \left(\alpha_i - \frac{\lambda\gamma_i}{1-\lambda}\right) P + \beta_i Q + \frac{\gamma_i}{1-\lambda} R'$$

geschrieben werden. Es ist möglich einen Parameter $0 < \lambda_0 < 1$ hinreichend klein zu wählen, sodass die Entwicklungskoeffizienten $\alpha_i - (\lambda_0\gamma_i)/(1 - \lambda_0)$ und $\gamma_i/(1 - \lambda_0)$ für alle Eckpunkte \mathcal{I}_i von INNPOL größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind und dass für mindestens einen Koeffizienten Gleichheit gilt. Dies bedeutet aber, dass PQR' ein Dreieck ist, das innerhalb von PQR liegt und dass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen der Punkte P , Q und R' sind, wobei die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind. Dann kann R nach Definition 3.24 nicht auf dem inneren Rand der AFS liegen. Die Annahme $\alpha_i > -\varepsilon_C$ und $\gamma_i > -\varepsilon_C$ führt somit zum Widerspruch.

3. Fall: Die Annahme, dass $\beta_i > -\varepsilon_C$ und $\gamma_i > -\varepsilon_C$ für jeden Eckpunkt \mathcal{I}_i von INNPOL gilt, wird, analog zum 2. Fall, zum Widerspruch geführt. Dies schließt den Beweis ab. \square

Sollen nun Punkte auf dem inneren Rand der AFS bestimmt werden, kann nach Satz 4.3 davon ausgegangen werden, dass zu jedem solchen Punkt R zwei Punkte P und Q auf dem Rand von FIRPOL existieren, sodass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P , Q und R sind und die Linearkoeffizienten in den Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind. Weiter kann nach Satz 4.5 angenommen werden, dass zu mindestens einem der Punkte P und Q ein Eckpunkt von INNPOL existiert, sodass der zugehörige Entwicklungskoeffizient zu diesem Punkt gleich $-\varepsilon_C$ ist. Angenommen für P existiert ein entsprechender Eckpunkt von INNPOL. Jeder Eckpunkt von INNPOL ist als Affinkombination von P , Q und R in der Form

$$\mathcal{I}_i = \alpha_i P + \beta_i Q + \gamma_i R$$

mit $\alpha_i + \beta_i + \gamma_i = 1$ und $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i \geq -\varepsilon_C$ darstellbar. Durch Addition von $\varepsilon_C P$ und anschließender Division durch $(1 + \varepsilon_C)$ ergibt sich die Gleichung

$$\frac{\mathcal{I}_i + \varepsilon_C P}{1 + \varepsilon_C} = \frac{\alpha_i + \varepsilon_C}{1 + \varepsilon_C} P + \frac{\beta_i}{1 + \varepsilon_C} Q + \frac{\gamma_i}{1 + \varepsilon_C} R. \quad (4.7)$$

Da die Summe der Linearkoeffizienten in der Gleichung (4.7) gleich 1 ist, sind alle Punkte $(\mathcal{I}_i + \varepsilon_C P)/(1 + \varepsilon_C)$ Affinkombinationen von P , Q und R . Wenn $\alpha_i = -\varepsilon_C$ gilt, liegt $(\mathcal{I}_i + \varepsilon_C P)/(1 + \varepsilon_C)$ auf der Geraden durch Q und R . Sonst liegt der Punkt auf derselben Seite dieser Geraden wie der Punkt P , denn für den Koeffizienten gilt dann $(\alpha_i + \varepsilon_C)/(1 + \varepsilon_C) > 0$. Während im Tangentialalgorithmus Tangenten an das innere Polygon zur Konstruktion des inneren Rands verwendet werden, werden im line-moving Algorithmus daher Tangenten an die Mengen

$$\mathcal{I}_P = \left\{ \frac{S + \varepsilon_C P}{1 + \varepsilon_C}, S \in \mathcal{I} \right\} \quad (4.8)$$

$$\mathcal{I}_Q = \left\{ \frac{S + \varepsilon_C Q}{1 + \varepsilon_C}, S \in \mathcal{I} \right\} \quad (4.9)$$

betrachtet, wobei \mathcal{I} die Menge der Eckpunkte von INNPOL bezeichnet. Die Mengen \mathcal{I}_P und \mathcal{I}_Q sind konvex. Dies folgt, da INNPOL ein konvexes Polygon ist.

Das genaue Vorgehen im line-moving Algorithmus ist im folgenden Abschnitt dargestellt.

4.3.2 Der line-moving Algorithmus

Der line-moving Algorithmus kann zur geometrischen Konstruktion der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ verwendet werden, wenn $\varepsilon_C > 0$ gilt. Für den Fall $\varepsilon_C = 0$ und $\varepsilon_A \geq 0$ kann der klassische Tangentialalgorithmus genutzt werden. In diesem Fall wird das Polygon FIRPOL bezüglich des Parameters ε_A entsprechend Definition 3.20 bestimmt. Nach Satz 3.22 gehört ein Punkt zur AFS $\mathcal{M}_{0, \varepsilon_A}$, wenn es im Inneren oder auf dem Rand von FIRPOL zwei weitere Punkte gibt, sodass das von den drei Punkten aufgespannte Dreieck INNPOL enthält. Entsprechende Dreiecke werden gerade im Tangentialalgorithmus konstruiert.

Grundlegend für die Konstruktion der AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ ist der Satz 4.5. Er begründet, dass Punkte auf dem inneren Rand approximiert werden können, indem ausgehend von zwei Punkten auf dem Rand von FIRPOL Tangenten an die Punktmengen \mathcal{I}_P und \mathcal{I}_Q (vergleiche die Gleichungen (4.8) und (4.9)) bestimmt werden.

Der Algorithmus beginnt mit der Konstruktion einer Tangenten r an das innere Polygon. Zunächst wird ein Hilfspunkt H konstruiert, der die Suchrichtung \bar{n} für Punkte der Menge

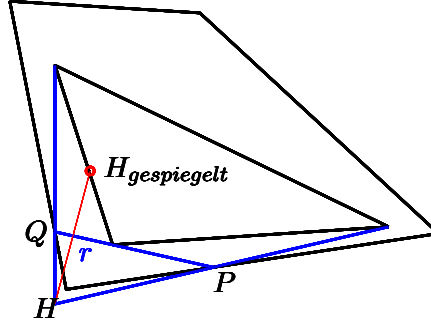


Abbildung 4.9: Konstruktion des Hilfspunktes H im line-moving Algorithmus. Wenn das Dreieck PQH INNPOL nicht enthält, wird der Punkt H an r gespiegelt. Der (gespiegelte) Punkt H gibt die Suchrichtung \bar{n} im Algorithmus vor.

$\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ im weiteren Verlauf des Algorithmus angibt.

Schritt 1: Bestimmen der Suchrichtung \bar{n}

1. Zu einer Tangente r an INNPOL werden die Schnittpunkte P und Q mit dem äußeren Polygon FIRPOL bestimmt.
2. Ausgehend von P beziehungsweise Q wird die Tangente q beziehungsweise p an INNPOL konstruiert.
3. Der Schnittpunkt von p und q ist H .
4. Wenn das Dreieck PQH das innere Polygon nicht umschließt, wird H an r gespiegelt. Andernfalls wird H nicht verändert.
5. Die Suchrichtung \bar{n} ist durch die Normale zu PQ gegeben, die von PQ in Richtung H zeigt.

Wenn H im Inneren von FIRPOL oder auf dem Rand von FIRPOL liegt und nicht gespiegelt wurde, gehört H zur AFS. Es handelt sich aber nicht um einen inneren Randpunkt der AFS, da $\varepsilon_C > 0$ gilt (vergleiche Satz 4.5). Ein Beispiel ist in Abbildung 4.9 dargestellt.

Zu den Punkten P und Q werden nun die Polygone \mathcal{I}_P und \mathcal{I}_Q entsprechend der Gleichungen (4.8) und (4.9) konstruiert. Diese Polygone müssen im weiteren Verlauf des Algorithmus für jedes Punktepaar P und Q aktualisiert werden. Ausgehend von P , Q , \mathcal{I}_P und \mathcal{I}_Q wird ein Punkt R konstruiert.

Schritt 2: Konstruktion des Punktes R

1. Die Polygone \mathcal{I}_P und \mathcal{I}_Q werden entsprechend der Gleichungen (4.8) und (4.9) konstruiert.
2. Ausgehend von P wird die Tangente q an das Polygon \mathcal{I}_Q konstruiert. Der Berührungspunkt der Tangente an \mathcal{I}_Q liegt in der Halbebene, die von r in Richtung der Normalen \bar{n} liegt.
3. Ausgehend von Q wird die Tangente p an das Polygon \mathcal{I}_P konstruiert. Der Berührungspunkt der Tangente an \mathcal{I}_P liegt in der Halbebene, die von r in Richtung der Normalen \bar{n} liegt.

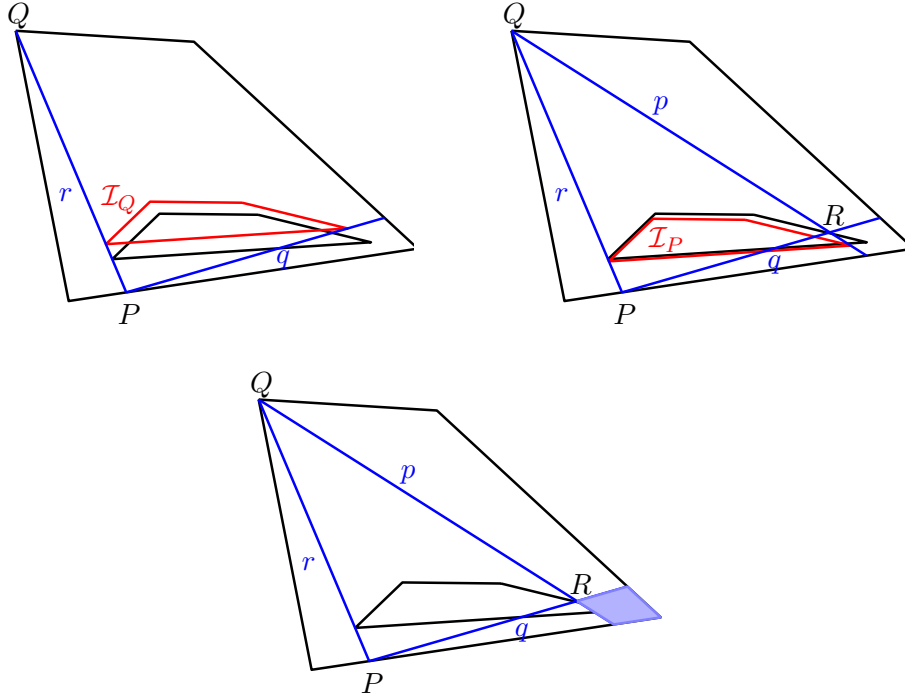


Abbildung 4.10: Konstruktion des Punktes R im line-moving Algorithmus. Oben links: Die Ausgangstangente r an INNPOL und die Tangente q an das Polygon \mathcal{I}_Q sind dargestellt. Oben rechts: Die Tangente p an das Polygon \mathcal{I}_P ist konstruiert. Unten: Der Punkt R ergibt sich als Schnittpunkt von p und q . Das blau gefärbte Polygon gehört zur AFS.

4. Der Schnittpunkt von p und q ist R .
5. Überprüfe, ob R im Inneren oder auf dem Rand von FIRPOL liegt.

Der Punkt R gehört zur verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$, wenn er innerhalb von FIRPOL liegt. Dies folgt aus Satz 4.5.

Die Gerade r durch PQ berührt INNPOL, schneidet INNPOL aber nicht. Im nächsten Schritt wird r parallel in beide mögliche Richtungen \bar{n} und $-\bar{n}$ verschoben. Zunächst wird r in die Richtung \bar{n} verschoben, sodass r INNPOL schneidet. Die Schnittpunkte der Geraden mit dem äußeren Polygon werden wieder mit P und Q bezeichnet. Der Hilfspunkt H und die Suchrichtung \bar{n} müssen nicht aktualisiert werden. Wie beschrieben werden die Polygone \mathcal{I}_P und \mathcal{I}_Q sowie der Punkt R konstruiert (vergleiche Abbildung 4.10). Der Abstand zwischen den betrachteten Parallelen sei δd . Die Verschiebung von r und Berechnung von R wird wiederholt, bis kein Punkt der AFS mehr erzeugt wurde. Dann wird r beginnend von der Tangente an INNPOL in die entgegengesetzte Richtung $-\bar{n}$ verschoben. Diese Verschiebung wird wiederholt bis r FIRPOL nicht mehr schneidet oder berührt. Die beschriebene Verschiebung von r ist zur Konstruktion der AFS nötig, da nach Satz 4.5 mindestens zwei Linearkoeffizienten in der affinen Darstellung der Eckpunkte von INNPOL den Wert $-\varepsilon_C$ annehmen. Wenn der Linearkoeffizient vor R in der Darstellung für einen Punkt von INNPOL negativ ist, muss die Gerade r in die Richtung des Inneren von INNPOL verschoben werden. Sollten die Linearkoeffizienten vor P und Q für jeweils mindestens einen Eckpunkt von INNPOL den Wert $-\varepsilon_C$ annehmen, ist nach dem Satz 4.5 nicht ausgeschlossen, dass für alle Eckpunkte von INNPOL der zugehörige Linearkoeffizient von R positiv ist. Daher wird die Gerade r ebenso in die entgegengesetzte Richtung verschoben.

Wenn der konstruierte Punkt R außerhalb von FIRPOL liegt, kann er vernachlässigt werden, da er nicht zur verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ gehören kann. Aus Satz 4.5 folgt, dass, wenn r INNPOL nicht schneidet und R innerhalb von FIRPOL liegt, dann gehört R zur AFS. Wenn r INNPOL schneidet, dann existiert mindestens ein Eckpunkt von INNPOL für den der Entwicklungskoeffizient bezüglich R in der affinen Darstellung negativ ist. Die Entwicklungskoeffizienten zu den Punkten P und Q sind durch die Konstruktion der Tangenten an \mathcal{I}_P und \mathcal{I}_Q größer oder gleich $-\varepsilon_C$. Daher muss in diesem Fall nur überprüft werden, ob auch die Entwicklungskoeffizienten γ_i zu R für alle Eckpunkte \mathcal{I}_i von INNPOL größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind. Ist dies erfüllt, so gehört R zur Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$. Zur AFS gehört dann auch die konvexe Menge, die durch den Rand von FIRPOL und die zwei Geraden durch P und R sowie durch Q und R begrenzt ist. Diese Menge ist in Abbildung 4.10 blau gekennzeichnet. Der Nachweis, dass diese Menge zur AFS gehört, kann analog zum Beweis von Satz 4.3 erbracht werden.

Wenn R innerhalb von FIRPOL liegt, aber die Bedingungen der Affinkombinationen nicht für alle Eckpunkte von INNPOL erfüllt sind, werden Punkte auf den Geraden q und p gesucht, die zur AFS gehören. Nach Satz 4.5 gibt es für mindestens zwei der Punkte P , Q und R einen Eckpunkt von INNPOL, sodass in der affinen Darstellung ein Entwicklungskoeffizient zu diesem Punkt gleich $-\varepsilon_C$ ist. Wenn also zu den Punkten P und Q auf dem Rand von FIRPOL ein Punkt R auf dem inneren Rand der AFS existiert, so muss dieser auf einer der Tangenten an die Mengen \mathcal{I}_P oder \mathcal{I}_Q liegen, die ausgehend von r in Richtung der Normalen \bar{n} liegen. Zunächst wird der Schnittpunkt R_1 der Geraden q mit FIRPOL bestimmt. Wenn die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von P , Q und R_1 sind, wobei die Linearkoeffizienten in der Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind, gehört R_1 zur AFS. Dann wird mittels Bisektion auf der Geraden q nach dem Punkt R_1^0 gesucht, der zur AFS gehört und den kürzesten Abstand zu R hat. Zur AFS gehört dann auch die konvexe Menge, die durch den Rand von FIRPOL, der Geraden durch R_1^0 und P und der Geraden durch R_1^0 und Q begrenzt ist. Analog wird der Punkt R_2 als Schnittpunkt der Geraden p mit dem Rand von FIRPOL bestimmt. Gehört R_2 zur AFS, so wird auf der Geraden p mittels Bisektion der Punkt R_2^0 bestimmt, der zur AFS gehört und den kleinsten Abstand zum Punkt R aufweist. Eine Veranschaulichung ist in Abbildung 4.11 dargestellt.

Eine kurze Zusammenfassung dieser Konstruktion ist im folgenden Schritt des Algorithmus gegeben.

Schritt 3: Bestimmen der Punkte R_1^0 und R_2^0

- Wenn der Punkt R außerhalb von FIRPOL liegt, gehört er nicht zur AFS und kann vernachlässigt werden.
- Falls R innerhalb von FIRPOL liegt, aber nicht zur AFS gehört, werden die Schnittpunkte R_1 und R_2 von p und q mit dem Rand von FIRPOL konstruiert:
 - wenn R_1 zur AFS gehört, bestimme den Punkt R_1^0 , der auf q liegt, zur AFS gehört und dessen Abstand zu R minimal ist.
 - wenn R_2 zur AFS gehört, bestimme den Punkt R_2^0 , der auf p liegt, zur AFS gehört und dessen Abstand zu R minimal ist.

Wenn die Gerade r ausgehend von der Tangente an INNPOL parallel in beide möglichen Richtungen verschoben wurde, bis sie eine nicht zulässige Position eingenommen hat, wird die Tangente um INNPOL rotiert und die Konstruktion wiederholt. Als Rotationswinkel wird $\delta\phi$ gewählt. Nach der Rotation von r werden P und Q sowie die Suchrichtung \bar{n} neu bestimmt.

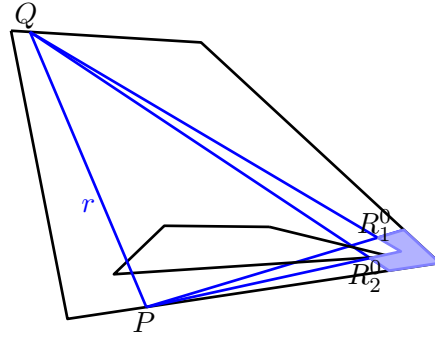


Abbildung 4.11: Konstruktion einer Teilmenge der AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ durch Parallelverschiebung der Gerade r in Richtung des Inneren von INNPOL. Das blau gefärbte Polygon gehört zur AFS. Die Punkte R_1^0 und R_2^0 wurden, wie in Schritt 3 beschrieben, konstruiert.

Der line-moving Algorithmus (Algorithmus 1) fasst die Schritte 1 bis 3 zusammen. Als Input werden die Polygone INNPOL und FIRPOL, die Diskretisierungsparameter δd und $\delta\phi$ sowie der Parameter ε_C benötigt.

Algorithmus 1 Der line-moving Algorithmus

Eingabe: INNPOL, FIRPOL, δd , $\delta\phi$ und ε_C .

Konstruiere die Ausgangstangente r an INNPOL.

$l = \lfloor 2\pi/(\delta\phi) \rfloor$

for $i = 1 : l$ **do**

 Rotiere die Tangente r um INNPOL mit dem Rotationswinkel $\delta\phi$.

Schritt 1 \rightarrow Bestimme den Hilfspunkt H und die Suchrichtung \bar{n} .

Schritt 2 \rightarrow Bestimme R .

while R , R_1^0 oder R_2^0 gehören zur AFS **do**

 Verschiebe r parallel in die Richtung \bar{n} (der Abstand der Parallelen ist δd).

Schritt 2 \rightarrow Bestimme R .

if R ist in FIRPOL, R gehört nicht zur AFS **then**

Schritt 3 \rightarrow Bestimme R_1^0, R_2^0 .

end if

end while

while r schneidet FIRPOL **do**

 Verschiebe r parallel in die Richtung $-\bar{n}$ (der Abstand der Parallelen ist δd).

Schritt 2 \rightarrow Bestimme R .

end while

end for

Die durch den line-moving Algorithmus bestimmten Punkte R , R_1^0 und R_2^0 gehören nach Satz 3.22 zur verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$. Außerdem erfüllen Punkte, die auf dem Rand der AFS liegen, die Bedingungen, die an die Konstruktion gestellt sind (vergleiche Satz 4.3 und Satz 4.5). Dies sind jedoch nur notwendige und keine hinreichenden Bedingungen, sodass die erhaltenen Punkte nicht zwangsläufig auf dem Rand der AFS liegen. Um zu entscheiden, ob die Punkte zum Inneren der Menge der zulässigen Lösungen gehören, wird überprüft, ob ein konstruierter Punkt \tilde{R} innerhalb eines der konvexen Polygone liegt, die durch den Rand von FIRPOL und den Schnitt mit den Geraden

durch RP und RQ (beziehungsweise R_1^0P und R_1^0Q , oder R_2^0P und R_2^0Q) begrenzt sind. Dabei werden für alle berechneten Punkte alle im Verlauf des Algorithmus auftretenden konvexen Polygone betrachtet. Punkte, die innerhalb dieser Polygone liegen, gehören nach Definition 3.24 nicht zum inneren Rand der AFS. Beispiele für diese konvexen Polygone sind in den Abbildungen 4.10 und 4.11 dargestellt.

4.3.3 Parameterwahl im line-moving Algorithmus

Die Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ hängt nach Definition 3.19 von den Parametern ε_C und ε_A ab, die eine untere Schranke für negative Einträge in den Matrizen SC und A vorgeben. Die Approximationsgenauigkeit im line-moving Algorithmus für die Menge $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ hängt zudem von den Diskretisierungsparametern δd und $\delta\phi$ ab.

Der Wert ε_A wird zur Konstruktion des äußeren Polygons FIRPOL benötigt. Es muss $SD \geq -\varepsilon_A$ erfüllt sein, da andernfalls Eckpunkte von INNPOL existieren, die außerhalb von FIRPOL liegen, vergleiche Bemerkung 3.21. Der Parameter ε_C wird im line-moving Algorithmus zur Konstruktion des Punktes R verwendet und um zu überprüfen, ob die konstruierten Punkte die Bedingung der Affinkombination für alle Eckpunkte von INNPOL erfüllen. Werden die Parameter ε_C oder ε_A vergrößert, wird die Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ nach Lemma 3.25 ebenfalls größer. Daher müssen, insbesondere bei wachsendem ε_C , im line-moving Algorithmus mehr parallele Geraden zu den Tangenten an INNPOL betrachtet werden, wodurch die Rechenzeit zunimmt.

Die Parameter δd und $\delta\phi$ haben keinen Einfluss auf die Menge $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$, aber auf die Approximationsgenauigkeit. Der Rotationswinkel $\delta\phi$ beschreibt um welchen Winkel die betrachteten Tangenten im Algorithmus rotiert werden. Eine Halbierung von $\delta\phi$ verdoppelt etwa die Rechenzeit, da doppelt so viele Tangenten r an INNPOL betrachtet werden müssen. Dabei wird die Rechenzeit zur Konstruktion von INNPOL und FIRPOL nicht beachtet. Wird der Rotationswinkel verkleinert, nimmt die Approximationsgüte zu, da mehr Punkte der AFS bestimmt werden. Der Parameter δd bestimmt den Abstand zwischen den im Algorithmus betrachteten Parallelen. Eine Halbierung des Wertes führt zu etwa doppelt so vielen betrachteten Geraden und damit zur Erhöhung der Laufzeit. Die Approximationsgenauigkeit nimmt dadurch ebenfalls zu. Numerische Beispiele werden im folgenden Abschnitt betrachtet.

4.3.4 Implementierung in FACPAC

Der line-moving Algorithmus wurde im *Generalized Borgen plots module* des Softwarepackets *FACPAC* implementiert [54, 55]. Ausgehend von einer Nutzeroberfläche in MATLAB können Matrizen D geladen und ihre Mengen zulässiger Lösungen bezüglich der RS- oder FSV-Skalierung berechnet werden. Die Berechnungen werden durch ein C-Programm ausgeführt. Die Parameter ε_C , ε_A , δd und $\delta\phi$ können vom Nutzer angepasst werden. Ein *live-view Modus* ermöglicht es den Mauspointer über die zweidimensionale Darstellung der Menge der zulässigen Lösungen zu bewegen und zeitgleich eine Darstellung der zu den jeweiligen Punkten gehörenden Zeilen der Matrix A zu erhalten. FACPAC ist unter www.math.uni-rostock.de/facpack/ [55] frei verfügbar.

4.4 Numerische Beispiele

Im Folgenden sollen zwei numerische Beispiele untersucht werden. Zunächst wird das durch Rauschen gestörte Modellproblem aus Kapitel 2.3.1 untersucht. Anschließend werden Messdaten, die mittels eines FTIR-Spektrometers aufgenommen wurden, analysiert.

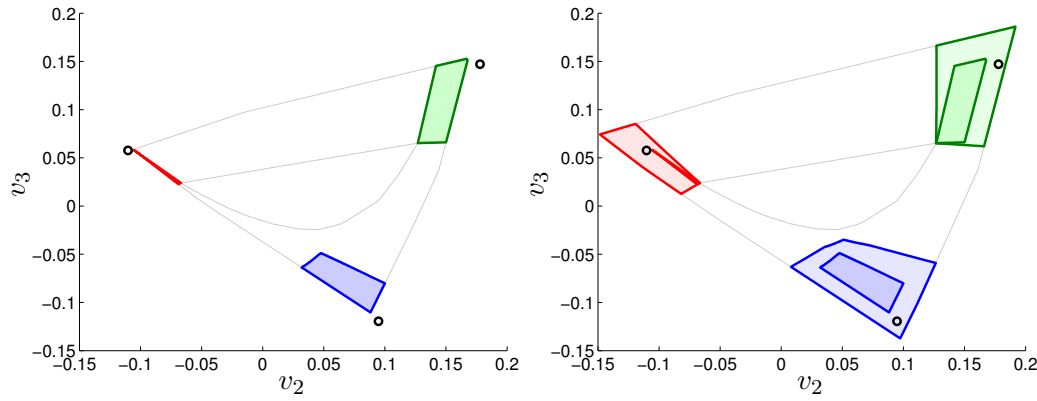


Abbildung 4.12: Darstellung der AFS des Modellproblems mit heteroskedastischem Rauschen in Form einer Normalverteilung mit Erwartungswert 0 und Standardabweichung 0.07. Die Punkte, die der niedrigdimensionalen Darstellung der Zeilen der Matrix A des Modellproblems aus Kapitel 2.3.1 entsprechen, sind mit einem schwarzen Kreis gekennzeichnet. Links ist die AFS $\mathcal{M}_{0,0}$ abgebildet. Die niedrigdimensionalen Darstellungen der Zeilen von A liegen nicht in der Menge der zulässigen Lösungen. Rechts sind die AFS $\mathcal{M}_{0,0}$ sowie $\mathcal{M}_{0.001,0.005}$ dargestellt. Die Punkte, die der niedrigdimensionalen Darstellungen der Zeilen von A zugeordnet sind, liegen in $\mathcal{M}_{0.001,0.005}$, aber nicht in $\mathcal{M}_{0,0}$.

4.4.1 Das Modellproblem mit heteroskedastischem Rauschen

Es wird das Modellproblem aus Kapitel 2.3.1, das mit heteroskedastischem normalverteiltem Rauschen gestört wurde, betrachtet. Die Matrix D ergibt sich aus der Matrix D_0 des Modellproblems als

$$D(i, j) = \max(D_0(i, j)(1 + \sigma), 0)$$

für $1 \leq i \leq 60$ und $1 \leq j \leq 70$. Dabei ist σ eine normalverteilte Zufallsvariable mit Erwartungswert 0 und Standardabweichung 0.07. An dem Beispiel soll der Einfluss der Parameter ε_C , ε_A , δd und $\delta\phi$ untersucht werden. Es wird dazu die RS-Skalierung verwendet.

Die Menge der zulässigen Lösungen wurde für die Rang-3-Approximation von D berechnet, die mittels der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung bestimmt wurde. Da in dem Beispiel die Rang-3-Approximation von D keine negativen Einträge enthält, kann die AFS mittels des Tangentalgorithmus berechnet werden. Für den Rotationswinkel wurde $\delta\phi = 0.01^\circ$ gewählt. Die Rechnungen wurden auf einem PC mit 2.1 GHz CPU und 8 GB RAM durchgeführt und die Rechenzeit betrug 0.831 s. Allerdings liegen die niedrigdimensionalen Darstellungen der Zeilen der Matrix A des Modellproblems nicht innerhalb der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} und sogar außerhalb des Polygons FIRPOL. Die verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{0.001,0.005}$ von D enthält hingegen die niedrigdimensionalen Darstellungen der Zeilen von A . Dies ist in Abbildung 4.12 dargestellt.

Für die Konstruktion der AFS $\mathcal{M}_{0.001,0.005}$ wurden im line-moving Algorithmus die Diskretisierungsparameter $\delta d = 0.001$ und $\delta\phi = 0.1^\circ$ verwendet. Für die Berechnung wurden 0.911 s benötigt. Die Rechenzeit im line-moving Algorithmus ist größer als im Tangentalgorithmus, da neben der Tangenten an INNPOL auch ihre Parallelen zur Konstruktion der AFS betrachtet werden müssen. In dem Beispiel steigt die Rechenzeit nicht sehr stark an, da die AFS aus relativ kleinen Flächensegmenten besteht.

Es soll weiter der Einfluss der Diskretisierungsparameter δd und $\delta\phi$ an dem Modellproblem untersucht werden. Es wird dazu die AFS $\mathcal{M}_{0.001,0.005}$ betrachtet. In der Tabelle 4.4.1 sind für verschiedene Parameterbelegungen die Rechenzeiten und die Hausdorff-Abstände zur AFS, die mit den Parametern $\delta d = 1.0 \cdot 10^{-5}$ und $\delta\phi = 0.01^\circ$ berechnet wurde, angegeben.

δd	$\delta\phi$	Rechenzeit in s	Hausdorff Abstand
$1.0 \cdot 10^{-5}$	0.01°	16.283	/
$1.0 \cdot 10^{-3}$	0.01°	16.671	$2.8 \cdot 10^{-17}$
$1.0 \cdot 10^{-2}$	0.01°	16.399	$4.1 \cdot 10^{-7}$
$1.0 \cdot 10^{-5}$	0.1°	0.8951	$1.7 \cdot 10^{-6}$
$1.0 \cdot 10^{-5}$	1.0°	0.6000	$3.5 \cdot 10^{-4}$

Eine Vergrößerung des Parameters δd führt dazu, dass die im line-moving Algorithmus betrachteten Parallelen einen größeren Abstand zueinander haben. Da die Fläche der Menge der zulässigen Lösungen in dem betrachteten Beispiel relativ klein ist, verändern sich die Rechenzeiten durch die Variation von δd kaum. Für $\delta d = 0.001$ liegt der Hausdorff-Abstand zur Vergleichsmenge im Rahmen der Maschinengenauigkeit. Für $\delta d = 0.01$ nimmt der Hausdorff-Abstand aber deutlich zu.

Der Parameter $\delta\phi$ beschreibt den Winkel, um den die Tangenten im Tangenten- und line-moving Algorithmus rotiert werden. Wird $\delta\phi$ verkleinert, werden weniger Tangenten im Algorithmus zur Konstruktion der AFS verwendet und die Rechenzeit nimmt ab. Gleichzeitig nimmt die Approximationsgenauigkeit ab.

In den Beispielen wurde die RS-Skalierung verwendet. Die Wahl des Parameters δd kann in dieser Skalierung damit begründet werden, dass die AFS nach Lemma 3.10 innerhalb des Einheitskreises liegt. In der FSV-Skalierung kann das äußere Polygon hingegen beliebig groß werden (vergleiche Abschnitt 3.2.4), daher kann es hilfreich sein, zunächst den Parameter $\varepsilon_C = 0$ zu setzen und die AFS mit dem Tangentialalgorithmus zu berechnen, bevor die Parameter δd und $\delta\phi$ gesetzt werden. Insbesondere wenn FIRPOL eine sehr große Fläche einnimmt, sollte δd nicht zu klein gewählt werden, da sich dies stark auf die Rechenzeit auswirkt. Die Approximationsgenauigkeit nimmt dadurch jedoch ebenfalls ab.

4.4.2 FTIR-Daten eines Hydroformylierungs-Prozesses

Der line-moving Algorithmus erweitert die geometrischen Methoden des Tangenten-Algorithmus für gestörte Daten. Das folgende Beispiel zeigt, dass der Algorithmus nicht nur für gestörte Modelldaten sondern ebenso für Messdaten angewendet werden kann.

Es werden Messdaten, die im Verlauf eines Hydroformylierungs-Prozesses mittels eines FTIR-Spektrometers aufgenommen wurden, untersucht. Der Datensatz umfasst $k = 1045$ Spektren, zu jeweils $n = 664$ spektralen Kanälen. Die Spektren sind in den Zeilen einer Matrix D angeordnet. An der betrachteten Reaktion sind drei unabhängige Komponenten beteiligt, nämlich Olefin, der Acylkomplex und der Hydridokomplex. Als Lösungsmittel wurde n-Hexan verwendet. Das Spektrum des Lösungsmittels wurde im Rahmen der Datenvorbehandlung von den gemessenen Spektren subtrahiert. Die weiteren experimentellen Details sind in [39] beschrieben.

Aufgrund von Störungen ergaben sich nach dem Abziehen des Spektrums des Lösungsmittels betragskleine negative Einträge in der Matrix D . Für die Rang-3-Approximation \tilde{D} von D gilt $\min(S\tilde{D}) = -0.000101$. Das bedeutet, dass der kleinste Eintrag in den bezüglich der RS-Skalierung skalierten Zeilen von \tilde{D} durch -0.000101 gegeben ist. Um die Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ in der RS-Skalierung mittels des line-moving

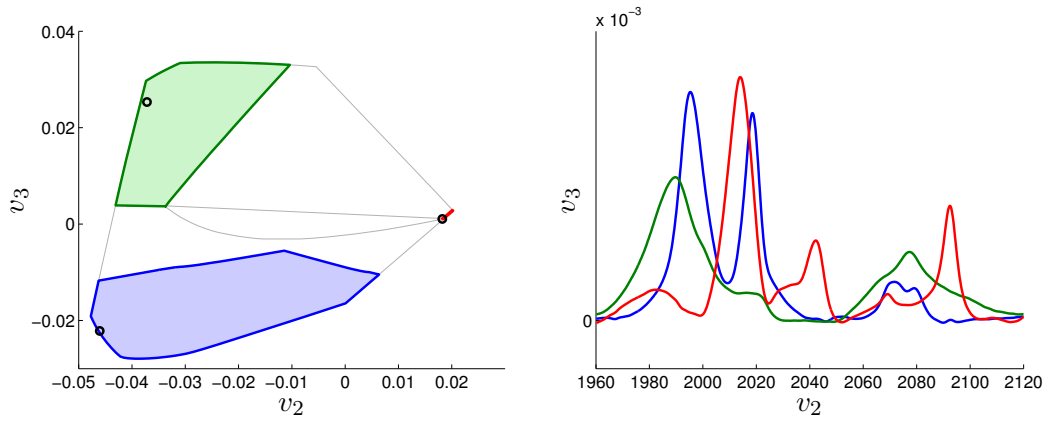


Abbildung 4.13: Links: Darstellung der Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ eines FTIR-Datensatz zu einem Hydroformylierungs-Prozesses mit $\varepsilon_C = 0.003$ und $\varepsilon_A = 0.000101$. Die Punkte, die der niedrigdimensionalen Darstellung der diskretisierten Reinspektren der Komponenten Olefin, dem Acylkomplex und dem Hydridokomplex entsprechen, sind mit einem schwarzen Kreis gekennzeichnet. Rechts: Darstellung der Reinkomponentenspektren. Die Farbe des Spektrums entspricht jeweils der Farbe der Zusammenhangskomponente der AFS in der linken Abbildung, in welcher die niedrigdimensionale Darstellung des Spektrums liegt. Das Spektrum von Olefin ist grün, das des Acylkomplexes blau und das des Hydridokomplexes rot dargestellt.

Algorithmus bestimmen zu können, muss daher $\varepsilon_A \geq 0.000101$ gelten. Andernfalls gibt es Eckpunkte von INNPOL, die außerhalb von FIRPOL liegen. Die Menge der zulässigen Lösungen für die Parameter $\varepsilon_C = 0.003$ und $\varepsilon_A = 0.000101$ ist in Abbildung 4.13 dargestellt. Für Olefin, den Acylkomplex und den Hydridokomplex sind die Reinspektren bekannt. Die niedrigdimensionalen Darstellungen dieser Spektren im Zeilenraum von \tilde{D} liegen in der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$. In [33] wurde die verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen für verschiedene Parameterwahlen von ε_C und ε_A detailliert betrachtet.

4.5 Fazit

Der in diesem Kapitel vorgestellte line-moving Algorithmus erlaubt es erstmals, die verallgemeinerte Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ für approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierungen vom Rang 3 geometrisch zu konstruieren. Damit sind die geometrischen Methoden auch im Fall von Störungen anwendbar. Allerdings ist die Bedingung, dass das innere Polygon INNPOL in dem äußeren Polygon FIRPOL enthalten sein muss, eine sehr strenge Forderung. Wenn D negative Einträge enthält, führt dies dazu, dass in der Faktorisierung negative Einträge vor allem in dem Faktor A auftreten. Durch Transposition der Ausgangsmatrix D können negative Einträge verstärkt dem Faktor C zugewiesen werden. Um Faktorisierungen $D = CA$ mit $\min(C) > \min(SD)$ und $\min(A) > \min(SD)$ zu erhalten, muss in der Konstruktion jedoch zunächst zwangsläufig $\varepsilon_A > -\min(SD)$ beziehungsweise $\varepsilon_C > -\min(SD)$ angenommen werden. Zudem ist zu einer gegebenen Matrix D nicht bekannt, wie groß die negativen Einträge in den Faktoren C und A sein sollten, um eine für das Anwendungsproblem relevante Faktorisierung zu erhalten. Allerdings erlaubt der Satz 3.25 die Parameter im Zweifelsfall größer zu wählen, um die bedeutungsvolle

Lösung zu erhalten.

Der Rechenaufwand des line-moving Algorithmus ist im Vergleich zum Tangenten-Algorithmus relativ hoch. Dies liegt zum einen an den betrachteten Parallelenscharen, von denen aus Punkte der AFS konstruiert werden. Zum anderen ist für die konstruierten Punkte nicht bekannt, ob sie zum inneren Rand der AFS gehören. Daher wird für jeden berechneten Punkt der AFS überprüft, ob er im Inneren der Menge der zulässigen Lösungen liegt. Durch eine weitere Analyse der Eigenschaften der Punkte auf dem inneren Rand der verallgemeinerten Menge der zulässigen Lösungen könnten möglicherweise Methoden zur Konstruktion der AFS entwickelt werden, die einen geringeren Rechenaufwand aufweisen.

5 Optimierungsverfahren zur Approximation der Menge zulässiger Lösungen

In Kapitel 4 wurden mit dem Tangenten- und dem line-moving Algorithmus geometrische Verfahren zur Konstruktion der Menge zulässiger Lösungen für Matrizen D vom Rang 3 angegeben. Neben den geometrischen Methoden können Algorithmen verwendet werden, die auf einem Optimierungsansatz basieren. Die Verfahren lassen sich zum Teil auch zur Berechnung der Mengen zulässiger Lösungen von Matrizen D höheren Ranges erweitern. Daher werden die Zielfunktionen der Optimierungsaufgabe im Folgenden allgemein für Matrizen vom Rang s dargestellt.

5.1 Zielfunktionen der Optimierungsaufgabe

Es sollen zunächst zwei Zielfunktionen eingeführt werden, mit deren Hilfe entschieden werden kann, ob ein Punkt zur Menge der zulässigen Lösungen gehört. Die erste Zielfunktion basiert auf der Forderung, dass die Einträge der Matrizen C und A nach unten beschränkt sind. Die Faktoren werden ausgehend von der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung, wie in Bemerkung 2.13 beschrieben, konstruiert. Die zweite Zielfunktion nutzt die geometrische Beschreibung der Menge der zulässigen Lösungen entsprechend des Satzes 3.22.

5.1.1 Zielfunktion unter Verwendung der approximativen Nichtnegativitätsforderung

Es soll untersucht werden, ob ein Punkt $t \in \mathbb{R}^{s-1}$ zur Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ der Rang- s -Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ gehört. Die Menge der zulässigen Lösungen werde dabei bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ betrachtet. Nach Definition 3.19 ist zu überprüfen, ob eine reguläre Matrix T existiert, für die

$$\begin{aligned} T(:, 2:s) &= \begin{pmatrix} t^T \\ Q \end{pmatrix} \quad \text{und} \\ TV^T w &= e \end{aligned} \tag{5.1}$$

gilt und die die Ungleichungen

$$\begin{aligned} \tilde{C} = SC &= SU\Sigma T^+ \geq -\varepsilon_C \quad \text{und} \\ A = TV^T &\geq -\varepsilon_A \end{aligned}$$

erfüllt. Die Matrix S ist entsprechend der Definition 3.19 gegeben. Zu einem gegebenen Punkt $t \in \mathbb{R}^{s-1}$ wird nun eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{(s-1) \times (s-1)}$ gesucht, sodass die Matrix T , die durch Gleichung (5.1) gegeben ist, die oben beschriebenen Bedingungen erfüllt. Die Regularität von T kann überprüft werden, indem verifiziert wird, ob $I = T^+ T$ gilt. Dabei bezeichnet I die Einheitsmatrix im $\mathbb{R}^{s \times s}$. Ein Punkt t gehört dann zur Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$, wenn eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{(s-1) \times (s-1)}$ existiert, sodass die Zielfunktion

$$f_{\text{NMF}}(t, Q) = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^s \min(\tilde{C}(i, j) + \varepsilon_C, 0)^2 + \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^n \min(A(i, j) + \varepsilon_A, 0)^2 + \|I - T^+ T\|_F^2 \quad (5.2)$$

den Wert 0 annimmt.

Die Funktion f_{NMF} ist analog zu den Zielfunktionen in den Arbeiten [57, 58] definiert. Allerdings ist f_{NMF} für beliebige Skalierungen gegeben. Zur Betrachtung der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} der nichtnegativen Matrixfaktorisierung kann $\varepsilon_C = \varepsilon_A = 0$ gewählt werden.

Um zu einem gegebenen Punkt t eine Matrix Q zu bestimmen, sodass $f_{\text{NMF}}(t, Q)$ minimal wird, kann etwa das Gauß-Newton Verfahren [12] oder das Levenberg-Marquardt Verfahren [29] angewendet werden. Benötigte Ableitungen können in den Verfahren durch finite Differenzen approximiert werden. In MATLAB steht die Funktion `lsqnonneg` der Optimization Toolbox zur Verfügung [45].

5.1.2 Zielfunktion unter Verwendung geometrischer Eigenschaften

Die geometrische Zielfunktion f_{geo} soll unter Verwendung derselben Argumente $t \in \mathbb{R}^{s-1}$ und $Q \in \mathbb{R}^{(s-1) \times (s-1)}$ wie die Zielfunktion f_{NMF} definiert werden. Dabei sind durch t und die transponierten Zeilen der Matrix Q insgesamt s Punkte im \mathbb{R}^{s-1} gegeben, die die Bedingungen von Satz 3.22 erfüllen sollen. Dazu ist zu überprüfen, ob diese Punkte innerhalb des Polytops FIRPOL liegen und ob die Eckpunkte von INNPOL als Affinkombination dieser Punkte darstellbar sind, wobei die Linearkoeffizienten der Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind. Ausgehend von dieser geometrischen Beschreibung soll die Zielfunktion f_{geo} definiert werden. Sie setzt sich aus den Funktionen f_F und f_I in der Form

$$f_{\text{geo}} = f_F + f_I \quad (5.3)$$

zusammen. Dabei erzwingt f_F , dass die betrachteten Punkte in FIRPOL liegen und f_I beschreibt, dass die Eckpunkte von INNPOL zulässige Affinkombinationen dieser s Punkte sind.

Nach Definition 3.20 liegt der Punkt $t = (t_1, \dots, t_{s-1})^T \in \mathbb{R}^{s-1}$ im Polytop FIRPOL, wenn die Ungleichung

$$t_1 \left(v_2^T - \frac{v_2^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) + \dots + t_{s-1} \left(v_s^T - \frac{v_s^T w}{v_1^T w} v_1^T \right) \geq -\varepsilon_A - \frac{v_1^T}{v_1^T w}$$

komponentenweise erfüllt ist. Ausgehend von dieser Ungleichungsbedingung werden eine Matrix $M \in \mathbb{R}^{n \times s-1}$ und ein Vektor $b \in \mathbb{R}^n$ als

$$M = \left(v_2 - \frac{v_2^T w}{v_1^T w} v_1, \dots, v_s - \frac{v_s^T w}{v_1^T w} v_1 \right) \quad \text{und} \\ b = -\varepsilon_A - \frac{v_1}{v_1^T w}$$

definiert. Der Vektor $w \in \mathbb{R}^s$ ist durch die gewählte Skalierungs-Hyperebene gegeben, vergleiche Kapitel 3.2.1 und ε_A gibt die untere Schranke für negative Einträge in dem Matrixfaktor A an. Gilt für den Punkt $t \in \mathbb{R}^{s-1}$ nun $Mt - b \geq 0$, dann liegt t in FIRPOL.

Dieselbe Beziehung soll für die transponierten Zeilen von Q gelten, da diese ebenfalls in FIRPOL liegen sollen. Die Funktion f_F kann demnach durch

$$f_F(t, Q) = \sum_{i=1}^n \left(\min(M(i, :)t - b_i, 0)^2 + \sum_{j=1}^{s-1} \min(M(i, :)Q(j, :)^T - b_i, 0)^2 \right) \quad (5.4)$$

definiert werden. Es gilt $f_F(t, Q) = 0$ genau dann, wenn t und die transponierten Zeilen von Q in FIRPOL liegen.

Die Funktion f_I erzwingt, dass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von t und den transponierten Zeilen von Q sind. Dabei sind die Linearkoeffizienten der Affinkombinationen nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt. Die Eckpunkte von INNPOL seien durch \mathcal{I}_i gegeben. Dann gilt

$$\mathcal{I}_i = g_{i,1}Q(1, :)^T + g_{i,2}Q(2, :)^T + \dots + g_{i,s-1}Q(s-1, :)^T + g_{i,s}t$$

mit $-\varepsilon_C \leq g_{i,1}, g_{i,2}, \dots, g_{i,s} \in \mathbb{R}$ und $g_{i,1} + g_{i,2} + \dots + g_{i,s} = 1$ für alle Eckpunkte \mathcal{I}_i von INNPOL. Die Koeffizienten $g_{i,1}, \dots, g_{i,s-1}$ erfüllen dann die Gleichung

$$\mathcal{I}_i - t = g_{i,1}(Q(1, :)^T - t) + g_{i,2}(Q(2, :)^T - t) + \dots + g_{i,s-1}(Q(s-1, :)^T - t) \quad (5.5)$$

und $g_{i,s}$ kann durch $g_{i,s} = 1 - \sum_{j=1}^{s-1} g_{i,j}$ berechnet werden. Die Gleichung (5.5) kann mittels einer Matrix $N \in \mathbb{R}^{(s-1) \times (s-1)}$ und Vektoren $g_i \in \mathbb{R}^{s-1}$ und $p_i \in \mathbb{R}^{s-1}$ als

$$Ng_i = p_i$$

geschrieben werden. Dabei sind N , p_i und g_i durch

$$\begin{aligned} N &= (Q(1, :)^T - t, \quad Q(2, :)^T - t, \quad \dots, Q(s-1, :)^T - t), \\ p_i &= \mathcal{I}_i - t \quad \text{und} \\ g_i &= (g_{i,1}, \quad g_{i,2}, \quad \dots, g_{i,s-1})^T \end{aligned}$$

gegeben. Unter der Voraussetzung, dass N eine reguläre Matrix ist, kann g_i aus $N^{-1}p_i$ berechnet werden. Sind die Komponenten von g_i durch $-\varepsilon_C$ nach unten beschränkt und gilt $g_{i,s} = 1 - \sum_{j=1}^{s-1} g_{i,j} \geq -\varepsilon_C$, so ist die Ecke \mathcal{I}_i von INNPOL eine zulässige Affinkombination der s Punkte, die durch t und die transponierten Zeilen von Q gegeben sind.

Die Funktion f_I kann nun durch

$$f_I(t, Q) = \sum_{i=1}^k \left(\sum_{j=1}^{s-1} \min(g_{i,j} + \varepsilon_C, 0)^2 + \min \left(1 - \sum_{j=1}^{s-1} g_{i,j} + \varepsilon_C, 0 \right)^2 \right) \quad (5.6)$$

definiert werden. Anstelle der Eckpunkte \mathcal{I}_i von INNPOL können die Punkte betrachtet werden, durch deren konvexe Hülle INNPOL definiert ist. Diese Punkte können aus den Zeilen von D entsprechend Definition 3.12 berechnet werden.

Nach Konstruktion der Funktionen f_F und f_I ist die Funktion f_{geo} durch die Summe von Fehlerquadraten gegeben. Damit weist f_{geo} eine äquivalente Struktur zu der Zielfunktion f_{NMF} (5.2) auf.

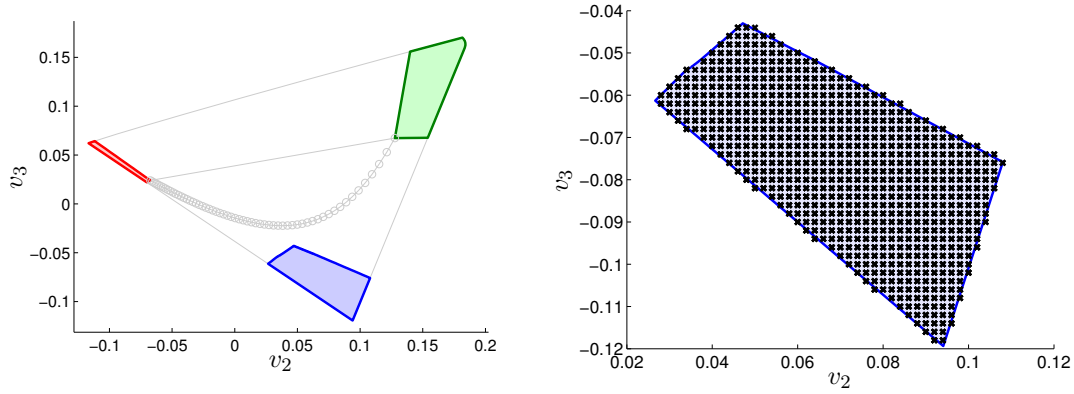


Abbildung 5.1: Links: AFS des Modellproblems aus Kapitel 2.3.1 in der RS-Skalierung. Rechts: Auswertung von Gitterpunkten zur Approximation der blau gefärbten Zusammenhangskomponente der AFS des Modellproblems mittels des grid search Algorithmus. Die Gitterpunkte für die die Zielfunktion f_{NMF} (5.2) Werte kleiner oder gleich $5.0 \cdot 10^{-8}$ annimmt, sind mit einem schwarzen x markiert. Die blau gekennzeichnete Fläche wurde mit dem Tangentialalgorithmus konstruiert.

5.2 Einige Verfahren zur Approximation der Menge zulässiger Lösungen

Es sollen nun einige in der Literatur beschriebene Methoden vorgestellt werden, mit denen unter Verwendung geeigneter Zielfunktionen die Menge der zulässigen Lösung \mathcal{M} beziehungsweise $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ konstruiert werden kann.

5.2.1 Der grid search Algorithmus

Eine Möglichkeit, um die Menge der zulässigen Lösungen zu approximieren, besteht darin, ein Gitter im \mathbb{R}^{s-1} zu betrachten und für die Gitterpunkte zu entscheiden, ob sie zur Menge der zulässigen Lösungen bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ gehören. Als Zielfunktion kann etwa f_{NMF} (5.2) verwendet werden. Zu einem festen Gitterpunkt t wird dann $f_{\text{NMF}}(t, Q)$ bezüglich Q minimiert. Diese Methode wird als grid search Verfahren bezeichnet.

Da nach Lemma 3.13 der Nullpunkt im Inneren des inneren Polytops liegt, kann die AFS auf dem Gitter ausgehend vom Nullpunkt approximiert werden. Wenn für einen Punkt t gilt, dass er nicht im Inneren oder auf dem Rand von FIRPOL liegt, gehören die weiteren Gitterpunkte in dieser Richtung (ausgehend vom Nullpunkt) nicht zur Menge der zulässigen Lösungen. Dies folgt aus Lemma 3.16. Bei diesem Verfahren ist es theoretisch möglich, die AFS zunächst mit einem groben Gitter zu approximieren und den Randbereich der Menge der zulässigen Lösungen durch feinere Gitter höher aufzulösen. Für Matrizen D vom Rang 2 wurde das grid search Verfahren etwa in den Arbeiten [1, 65] angewendet. Es kann aber für Matrizen beliebigen Ranges genutzt werden. Zu beachten ist jedoch der wachsende Aufwand, da aufgrund der höheren Dimension mehr Gitterpunkte auftreten und zusätzlich über mehr freie Variablen optimiert werden muss. In Abbildung 5.1 ist ein Beispiel für die Auswertung von Gitterpunkten zur Approximation einer Zusammenhangskomponente der AFS des Modellproblems aus Kapitel 2.3.1 dargestellt. Die AFS ist dabei in der RS-

Skalierung gegeben.

Das Verfahren ist leicht zu implementieren. Der Rechenaufwand ist jedoch recht hoch, da für jeden einzelnen Gitterpunkt zu entscheiden ist, ob er zur Menge der zulässigen Lösungen gehört. Es würde jedoch genügen den Rand der AFS zu bestimmen. Die beiden im Folgenden beschriebenen Verfahren basieren daher auf der Randapproximation der Menge der zulässigen Lösungen.

5.2.2 Der triangle-boundary-enclosing Algorithmus

Golshan, Abdollahi und Maeder schlugen in [26] einen Algorithmus vor, bei dem der Rand der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen vom Rang 3 durch Dreiecksketten approximiert wird. Daher wird der Algorithmus als triangle-boundary-enclosing Algorithmus bezeichnet [56].

Zunächst wird eine nichtnegative Matrixfaktorisierung $D = CA$ bestimmt, etwa mit dem Algorithmus von Kim und Park [36]. Ausgehend von den Zeilen von D können Punkte bestimmt werden, die in der AFS bezüglich der Skalierungs-Hyperebene $w^T x = 1$ liegen, vergleiche Kapitel 3.2.1. Einer der Punkte wird nun in eine feste Richtung verschoben und entschieden, ob der verschobene Punkt zur Menge der zulässigen Lösungen gehört. Auf diese Weise werden zwei Punkte mit euklidischem Abstand h konstruiert, sodass einer der Punkte im Inneren der AFS liegt und einer außerhalb der AFS. Die beiden Punkte werden zu einem gleichseitigen Dreieck ergänzt. Dabei ist es nicht relevant, ob der dritte Punkt innerhalb oder außerhalb der Menge der zulässigen Lösungen liegt. Das Dreieck wird nun an einer Kante gespiegelt, die den Rand von FIRPOL schneidet. Analog wird für das neu entstandene Dreieck verfahren. Dieses Vorgehen wird wiederholt, bis die Dreieckskette das Ausgangsdreieck erreicht. Die so konstruierte Dreiecksfolge approximiert den Rand einer Zusammenhangskomponente der Menge der zulässigen Lösungen oder falls die AFS aus genau einer Zusammenhangskomponente besteht, wird der innere oder äußere Rand der AFS approximiert.

Liegen alle drei Punkte innerhalb oder außerhalb der eingeschlossenen Fläche, so besteht die Menge der zulässigen Lösungen aus genau einer Zusammenhangskomponente mit einem Loch. Dann ist weiter der innere beziehungsweise äußere Rand der AFS durch eine Dreieckskette zu approximieren. Andernfalls wird ausgehend von den weiteren Zeilen der Matrix A jeweils ein Dreieck auf dem Rand der AFS konstruiert und der Rand des zugehörigen Segments mit einer Folge von Dreiecken angenähert. Ein Beispiel für die Approximation einer Zusammenhangskomponente der Menge der zulässigen Lösungen mittels des triangle-boundary-enclosing Algorithmus ist in Abbildung 5.2 dargestellt.

Wenn die Menge der zulässigen Lösungen aus mehr als drei Zusammenhangskomponenten besteht, können durch den triangle-boundary-enclosing Algorithmus nicht alle Segmente der AFS bestimmt werden. In Kapitel 7 wird gezeigt, dass es tatsächlich nichtnegative Matrizen D vom Rang 3 gibt, deren zugehörige Menge der zulässigen Lösungen aus mehr als drei Zusammenhangskomponenten besteht.

Die Approximationsgenauigkeit des triangle-boundary-enclosing Algorithmus ist abhängig von der Seitenlänge h der Dreiecke, die den Rand approximieren. Wird h halbiert, werden etwa doppelt so viele Dreiecke für die Randapproximation benötigt und der Rechenaufwand verdoppelt sich.

Der Algorithmus wurde in [27] zur Approximation der AFS einer Matrix D vom Rang 4 angewendet. Dazu wurde die AFS, die im \mathbb{R}^3 liegt, mit zueinander parallelen Ebenen geschnitten und der Rand des Schnittes der AFS mit der jeweiligen Ebene durch Dreiecksketten approximiert. Eine Verallgemeinerung dieses Ansatz für Mehrkomponentensysteme scheint jedoch nicht praktikabel.

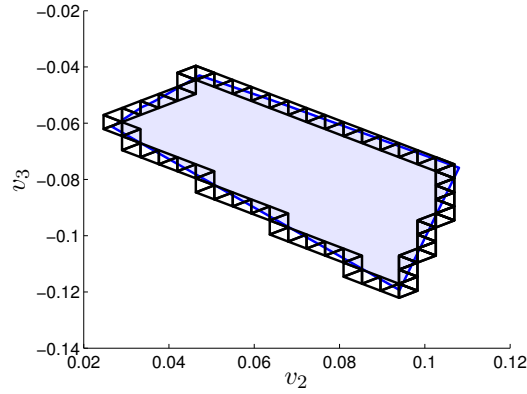


Abbildung 5.2: Approximation einer Zusammenhangskomponente der Menge der zulässigen Lösungen des Modellproblems aus Kapitel 2.3.1 mittels des triangle-boundary-enclosing Algorithmus. Zur Berechnung wurde die Zielfunktion f_{NMF} (5.2) verwendet und ein Punkt als zur AFS gehörend bewertet, wenn die Zielfunktion nach Optimierung einen Wert kleiner oder gleich $5.0 \cdot 10^{-8}$ annimmt. Die blau markierte Fläche wurde mit dem Tangentalgorithmus konstruiert.

5.2.3 Der polygon-inflation Algorithmus

Der polygon-inflation Algorithmus kann zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen D vom Rang 3 eingesetzt werden. Er basiert wie der triangle-boundary-enclosure Algorithmus auf der Idee, ausschließlich den Rand der AFS zu approximieren. Sawall und Neymeyr schlugen zwei Varianten des Algorithmus vor [56, 57]. Bei der ersten wird der Rand einer Zusammenhangskomponente der AFS approximiert, indem ausgehend von einem Punkt innerhalb der Komponente der Rand dieses Segment durch adaptiv konstruierte Polygone angenähert wird. Ausgehend von einer nichtnegativen Faktorisierung von D können drei Punkte innerhalb der AFS angegeben werden. Von einem dieser Punkte werden Strahlen in drei Richtungen betrachtet und die Punkte auf diesen Strahlen bestimmt, die zum Rand der AFS gehören. Diese Punkte können unter Verwendung der zu minimierenden Zielfunktion f_{NMF} (5.2) oder f_{geo} (5.3) und dem Bisektionsverfahren approximiert werden. Das so erhaltene Dreieck ist das Ausgangspolygon für die folgenden Konstruktionen. Für alle Polygonseiten wird der Schnittpunkt der Normalen, die durch den Seitenmittelpunkt verläuft, mit dem Rand von FIRPOL bestimmt. Diese Randpunkte der AFS werden zu dem Polygon hinzugefügt. Zudem wird zu jedem Punkt der Flächenzuwachs des AFS-Segments gespeichert. Nachdem dies für alle Dreiecksseiten durchgeführt wurde, wird dieses Vorgehen nacheinander auf die Seiten angewendet, bei denen zuletzt der größte Flächengewinn erreicht wurde. Dieses Vorgehen wird wiederholt, bis eine vorgegebene Genauigkeit erreicht ist. Ein Beispiel für die Approximation einer Zusammenhangskomponente der Menge der zulässigen Lösungen des Modellproblems aus Kapitel 2.3.1 ist in Abbildung 5.3 gegeben.

Besteht die AFS aus drei Zusammenhangskomponenten wird die Konstruktion ausgehend von jedem Punkt, der durch die Ausgangsfaktorisierung von D gegeben ist, durchgeführt. Liegt eine AFS vor, die aus einem Segment mit einem Loch besteht, müssen der innere und äußere Rand approximiert werden. Dazu kann der beschriebene Algorithmus genutzt werden, um den Rand des äußeren Polygons anzunähern. Zur Approximation des

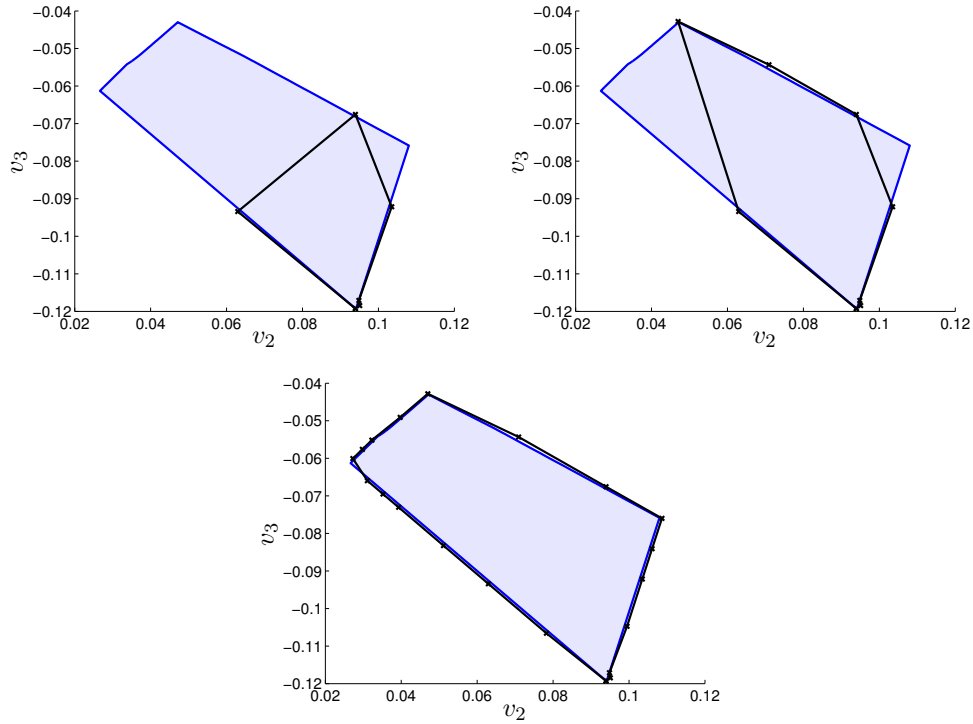


Abbildung 5.3: Approximation einer Zusammenhangskomponente der Menge der zulässigen Lösungen des Modellproblems aus Kapitel 2.3.1 mittels des polygon-inflation Algorithmus. Zur Berechnung wurde die Zielfunktion f_{NMF} (5.2) verwendet und ein Punkt als zur AFS gehörend bewertet, wenn der Wert der Zielfunktion nach Optimierung kleiner oder gleich $1.0 \cdot 10^{-8}$ ist. Die blau markierte Fläche wurde mit dem Tangentalgorithmus konstruiert. Oben links: Ein Viereck, dessen Eckpunkte auf dem Rand der AFS liegen. Oben rechts: Das Polygon wird adaptiv aufgebläht. Eine Verfeinerung erfolgt an der Polygonseite, für die im letzten Schritt der größte Flächengewinn erreicht wurde. Unten: AFS Approximation nach 15 Verfeinerungsschritten.

inneren Rand der AFS kann ausgehend vom Nullpunkt (vergleiche Lemma 3.13) ein Polygon konstruiert werden, das nicht zur AFS gehört.

Der zweite Ansatz zur Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen mittels des polygon-inflation Algorithmus basiert auf der Idee, die Menge $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ als Schnitt der Obermengen $\bar{\mathcal{M}}_{\varepsilon_A}$ und $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}^+$ darzustellen. Die Mengen sind bezüglich der Skalierungsebene $w^T x = 1$ durch

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{M}}_{\varepsilon_A} = \{t \in \mathbb{R}^{s-1} : \exists \bar{t} \in \mathbb{R}^s : \bar{t}(2:s) = t, \\ \bar{t}^T V^T w = 1, \bar{t}^T V^T \geq -\varepsilon_A\} \quad \text{und} \\ \mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}^+ = \{t \in \mathbb{R}^{s-1} : \exists T \in \mathbb{R}^{s \times s} : \det(T) \neq 0, T(1, 2:s) = t^T, \\ TV^T w = e, T(2:s, :)V^T \geq -\varepsilon_A, SU\Sigma T^{-1} \geq -\varepsilon_C\} \end{aligned} \quad (5.7)$$

gegeben, vergleiche [57] und Definition 3.19. Die Zielfunktionen der Optimierungsaufgabe sind nun so zu definieren, dass sie für Punkte innerhalb der Mengen $\bar{\mathcal{M}}_{\varepsilon_A}$ und $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}^+$ den Wert 0 annehmen.

Die Menge der zulässigen Lösungen wird nun bestimmt, indem die Mengen $\bar{\mathcal{M}}_{\varepsilon_A}$ durch adaptiv verfeinerte Polygone approximiert wird und anschließend die Teilmenge von $\bar{\mathcal{M}}_{\varepsilon_A}$ bestimmt wird, die auch in $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}^+$ enthalten ist. Dazu können ebenfalls adaptiv verfeinerte Polygone genutzt werden. Dieses Verfahren wird als inverse polygon-inflation Algorithmus bezeichnet. Der Ansatz kann zur Bestimmung der Menge der zulässigen Lösungen von Matrizen D vom Rang 4 erweitert werden. Dann werden die Mengen $\bar{\mathcal{M}}_{\varepsilon_A}$ und $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}^+$ mittels adaptiv konstruierter Polyeder approximiert.

5.2.4 Der particle swarm Algorithmus

Der particle swarm Algorithmus wurde von Skvortsov [61] vorgeschlagen und auf Zwei- und Dreikomponentensysteme angewendet. Das Verfahren könnte aber für beliebige Mehrkomponentensysteme erweitert werden. Der Algorithmus basiert auf der Modellierung eines Schwarms von Teilchen, die sich im \mathbb{R}^{s-1} unter gegebenen Einschränkungen bewegen. Zu Beginn des Algorithmus werden P Teilchen generiert, deren Koordinaten und Geschwindigkeiten durch Zufallszahlen initialisiert werden. Ob ein Teilchen zu einem gegebenen Zeitpunkt innerhalb der AFS liegt, kann etwa mittels der Zielfunktion f_{NMF} (5.2) entschieden werden.

Für jedes Teilchen wird das Minimum der Zielfunktion bestimmt und es wird sowohl das Minimum, das für den gesamten Schwarm erreicht wird, als auch das Minimum, das für jedes Teilchen im Verlauf angenommen wurde, gespeichert und in jedem Schritt aktualisiert. Dann werden die Teilchen entsprechend ihrer zugewiesenen Geschwindigkeiten bewegt und an der aktuellen Position ausgewertet.

Die Teilchen werden nach [61] in zwei Gruppen sortiert, die inneren und die regulären Teilchen. Ein Teilchen am Ort p gehört zur Gruppe der inneren Teilchen, wenn für das Minimum der Zielfunktion in p die Ungleichung

$$\min_{Q_1} f_{\text{NMF}}(p, Q_1) < \min_{Q_2} f_{\text{NMF}}(g, Q_2) + \varepsilon$$

erfüllt ist. Dabei ist g der Punkt, an dem bis zum aktuellen Iterationsschritt der kleinste Wert der Zielfunktion erreicht wurde und $\varepsilon > 0$ ist eine fest gewählte Konstante. Ist diese Bedingung nicht erfüllt, liegt ein reguläres Teilchen vor. Die inneren Teilchen werden mit einer Ladung versehen, so dass sich diese bei der Bewegung voneinander abstoßen. Zwischen den regulären Teilchen untereinander und zwischen den regulären und inneren

Teilchen wirken keine Kräfte. Die Kräfte zwischen den inneren Teilchen sorgen dafür, dass sich diese Teilchen über die Fläche der AFS verteilen. Durch die regulären Teilchen werden bei ausreichender Teilchenanzahl alle Zusammenhangskomponenten der AFS erkannt.

Der Algorithmus wird beendet, wenn sich die Verteilung der Teilchen über mehrere Iterationsschritte kaum verändert oder aufgrund der wirkenden Kräfte sehr kleine Teilchengeschwindigkeiten über mehrere Iterationsschritte vorliegen. Für Details siehe [61].

Der particle swarm Algorithmus von Skvortsov basiert auf den Ideen von [35, 60], die sich mit Partikelschwarmoptimierung beschäftigen. Die Teilchenbewegungen sind so angepasst, dass der Algorithmus nicht gegen einen Lösungspunkt konvergiert, sondern dass die Partikel sich innerhalb der Menge der zulässigen Lösungen verteilen. Der Rand der AFS wird durch den Algorithmus jedoch nicht genau bestimmt. Während die zuvor beschriebenen Ansätze zur Berechnung der AFS den Ansatz verfolgen, die gesamte Menge zu approximieren, werden mit dem particle swarm Algorithmus einzelne Punkte innerhalb der AFS bestimmt.

5.2.5 Der Strahlenalgorithmus

Als ein letztes Verfahren soll der Strahlenalgorithmus vorgestellt werden. Er bildet die Grundlage für die Berechnung der Menge der zulässigen Lösungen von Vierkomponentensystemen in Kapitel 6. Der Algorithmus basiert auf Lemma 3.16. Dieses besagt, dass im ungestörten Fall der Schnitt der AFS mit einem vom Nullpunkt ausgehenden Strahl eine zusammenhängende und abgeschlossene Menge ist. Der Algorithmus wurde von Sawall und Neymeyr in [58] vorgeschlagen und kann zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen für nichtnegative Matrizen beliebigen Ranges angewendet werden.

Zur Approximation der AFS einer Matrix D vom Rang s , werden äquiangulare Strahlen im $s - 1$ dimensionalem Raum betrachtet. Diese können etwa mittels generalisierter Polarkoordinaten definiert werden. Für jeden Strahl wird der Schnittpunkt r_F mit dem Rand des äußeren Polytops FIRPOL bestimmt. Anschließend wird mittels der Zielfunktion f_{NMF} (5.2) oder f_{geo} (5.3) entschieden, ob der Punkt r_F zur Menge der zulässigen Lösungen gehört. Ist dies der Fall, wird auf dem Strahl nach dem Punkt r_i gesucht, der zur AFS gehört und den kleinsten Abstand zum Nullpunkt hat. Dies kann durch eine Bisektion erfolgen. Die Punkte r_F liegen auf dem äußeren Rand der AFS, während die Punkte r_i zum inneren Rand gehören, vergleiche Definition 3.18. Im Fall von Zweikomponentensystemen ist die Konstruktion trivial, da die Menge der zulässigen Lösungen dann bereits aus genau zwei Intervallen besteht. In Abbildung 5.4 ist ein Segment der AFS des Modellproblems aus Kapitel 3.2.1 dargestellt, das mittels des Strahlenalgorithmus approximiert wurde.

In Kapitel 6 wird der Strahlenalgorithmus zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen von Matrizen D vom Rang 4 angewendet. Dabei werden geometrische Eigenschaften der AFS genutzt um das Verfahren zu beschleunigen.

5.3 Fazit

Die Menge der zulässigen Lösungen kann mittels einer Vielzahl möglicher Verfahren unter Verwendung eines Optimierungsansatzes bestimmt werden. Gegenüber den geometrischen Methoden für Matrizen vom Rang 3 wird hierbei nicht analytisch entschieden, ob ein Punkt zur AFS gehört. Die Approximationsgenauigkeit hängt daher neben der Methodenwahl auch von dem verwendeten Optimierungsverfahren und der Zielfunktion ab. Ein kritischer Punkt ist die geeignete Wahl von Startwerten. Es ist zweckmäßig geometrische Eigenschaften der AFS bei der Konstruktion mittels Optimierungsverfahren zu berücksichtigen. Es kann etwa die Beschränktheit der Menge der zulässigen Lösungen in der RS-Skalierung bei

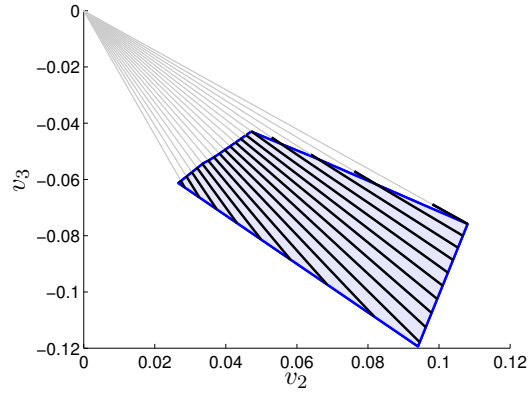


Abbildung 5.4: Approximation einer Zusammenhangskomponente der Menge der zulässigen Lösungen des Modellproblems aus Kapitel 2.3.1 mittels des Strahlenalgorithmus. Zur Berechnung wurde die Zielfunktion f_{NMF} (5.2) verwendet und ein Punkt als zur AFS gehörend bewertet, wenn der Wert der Zielfunktion nach Optimierung kleiner oder gleich $1.0 \cdot 10^{-8}$ ist. Die blau markierte Fläche wurde mit dem Tangentialalgorithmus konstruiert. Die grauen Linien zeigen die von Nullpunkt ausgehenden Strahlen, die die Zusammenhangskomponente der AFS schneiden.

der Konstruktion der AFS mittels des grid search Algorithmus genutzt werden. Auch der Strahlenalgorithmus basiert nach Lemma 3.16 auf der Geometrie der AFS. In Kapitel 6 wird für Matrizen D vom Rang 4 eine Variation des Strahlenalgorithmus vorgestellt, die zusätzliche geometrische Konstruktionen verwendet.

6 Konstruktion der Menge zulässiger Lösungen für Rang-4-Matrizen

Die Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} zu Matrizen $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang 4 ist eine abgeschlossene Menge im \mathbb{R}^3 , die zwischen den Polyedern INNPOL und FIRPOL eingebettet ist, vergleiche die Definition 3.14. Während es für Matrizen D vom Rang 2 und 3 geometrische Verfahren gibt, um die Menge der zulässigen Lösungen zu bestimmen, sind entsprechende Methoden für Matrizen vom Rang 4 bisher nicht bekannt. Ist D eine Matrix vom Rang 2, so ist die Menge der zulässigen Lösungen in \mathbb{R} durch zwei Intervalle gegeben. Für Matrizen D vom Rang 3 kann die AFS \mathcal{M} mittels des Tangentialalgorithmus bestimmt werden, vergleiche Kapitel 4.2.2. Wird versucht die geometrischen Konstruktionen auf Vierkomponentensysteme zu übertragen, ergeben sich die folgenden Schwierigkeiten. Während im Dreikomponentensystem einem Punkt P , der im äußeren Polygon FIRPOL und außerhalb des inneren Polygons INNPOL liegt, genau zwei Tangenten an INNPOL zugeordnet sind (vorausgesetzt P ist selbst kein Eckpunkt von INNPOL), ist einem solchen Punkt P im Vierkomponentensystem ein Tangentenkegel an das innere Polyeder zugewiesen. Im Fall von Rang-3-Matrizen können die beiden erhaltenen Tangenten als Seiten eines Dreiecks gewählt werden, das INNPOL enthält. Existiert ein solches Dreieck, so gehört P zur Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} . Im Fall von Rang-4-Matrizen müsste hingegen ein von P ausgehender Tetraeder gewählt werden, der das innere Polyeder umschließt. Der Tangentenkegel an INNPOL kann dazu in der Regel nur zur Einschränkung der Menge möglicher Eckpunkte des Tetraeders genutzt werden, da er nicht zwangsläufig genau drei erzeugende Strahlen aufweist. Die geometrischen Konzepte des Tangentialalgorithmus lassen sich daher nicht ohne weiteres auf Vierkomponentensysteme übertragen. Dies schließt allerdings nicht aus, dass ein geometrischer Algorithmus zur Berechnung der AFS in Vierkomponentensystemen existieren kann.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird der Aufwand zur Ermittlung des nichtnegativen Ranges von Matrizen D vom Rang 4 untersucht und auf die Komplexität der nichtnegativen Rangfaktorisierung eingegangen. Im Weiteren wird beschrieben, wie die Menge der zulässigen Lösungen einer Matrix D vom Rang 4 unter Verwendung von geometrischen Konstruktionen und einem Optimierungsansatz approximiert werden kann. Dazu wird der in Abschnitt 5.2.5 eingeführte Strahlenalgorithmus verwendet.

6.1 Die Existenz nichtnegativer Rangfaktorisierungen von Rang-4-Matrizen

Das Entscheidungsproblem, ob zu einer nichtnegativen Matrix D eine nichtnegative Rangfaktorisierung existiert, sowie das Bestimmen des nichtnegativen Ranges einer Matrix wurden in der Literatur der Komplexitätsklasse NP zugeordnet [20, 25, 64]. Für Matrizen vom Rang 3 kann durch den Algorithmus von Aggarwal der nichtnegative Rang einer Matrix D durch geometrische Konstruktionen bestimmt werden (vergleiche Abschnitt 4.2.2). In diesem Fall liegt das Entscheidungsproblem, ob eine nichtnegative Rangfaktorisierung existiert in P . Für Matrizen höheren Ranges, liegt dieses Entscheidungsproblem im Allgemeinen in

NP, wie etwa von Vavasis [64] gezeigt wurde.

Vavasis [64] überführt die Fragestellung, ob zu einer Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ eine nichtnegative Rangfaktorisierung existiert, in das geometrische Problem der Existenz eines zwischen zwei Polytopen eingebetteten Simplex, vergleiche Kapitel 3. Um zu zeigen, dass das Problem in NP liegt, wird das 3-SAT-Problem auf diese Fragestellung reduziert. Ausgehend von einer aussagenlogischen Formel mit q Klauseln, die gleichzeitig zu erfüllen sind und in denen p verschiedene Variablen auftreten können, werden zwei Polytope im \mathbb{R}^{3p+q} definiert, zu denen ein eingebettetes Simplex gesucht ist. Die Polytope sind gerade so konstruiert, dass von einem eingebetteten Simplex eine Variablenbelegung abgeleitet werden kann, für die die aussagenlogische Formel erfüllt ist. Damit hat Vavasis gezeigt, dass das eingebettete Simplexproblem NP-vollständig ist und somit auch die Existenz einer nichtnegativen Rangfaktorisierung im allgemeinen NP-vollständig sein muss. Allerdings werden in [64] Polytope im \mathbb{R}^{3p+q} untersucht. Um eine Aussage über mögliche Rangfaktorisierungen einer Rang-4-Matrix zu treffen, müsste entweder $p = 0$ und $q = 3$ oder $p = 1$ und $q = 0$ gelten. In jedem Fall kann dieser Variablenbelegung keine 3-SAT Formel mit q Klauseln und p Variablen zugeordnet werden. Die Ergebnisse von Vavasis sind dennoch von Bedeutung, da sie die Existenzfrage von nichtnegativen Rangfaktorisierungen für Matrizen höheren Ranges der Komplexitätsklasse NP zuordnen.

In diesem Zusammenhang kann auch die Arbeit von Das und Joseph [20] genannt werden. Sie zeigen, dass das Auffinden eines minimalen zwischen zwei Polyedern eingebetteten Polyeders in NP liegt. Unter einem minimalen Polyeder wird dabei ein Polyeder mit minimaler Flächenanzahl verstanden. Entsprechen das innere und das äußere Polyeder gerade den Polyedern INNPOL und FIRPOL zu einer nichtnegativen Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ und weist das minimale eingebettete Polyeder auch die minimale Anzahl an Eckpunkten auf, so kann diesem Polyeder eine nichtnegative Rangfaktorisierung von $D = CA$ mit $C \in \mathbb{R}^{k \times s_+}$ und $A \in \mathbb{R}^{s_+ \times n}$ zugeordnet werden. Dabei ist s_+ minimal und entspricht dem nichtnegativen Rang von D . Dies folgt aus Lemma 3.2.

Anstelle nach der Existenz einer Rangfaktorisierung zu einer Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ zu fragen, kann auch untersucht werden, ob es zu einer gegebenen Zahl $s \in \mathbb{N}$ eine Faktorisierung $D = CA$ mit $C \in \mathbb{R}^{k \times s}$ und $A \in \mathbb{R}^{s \times n}$ gibt. Dieses Entscheidungsproblem liegt nach Arora et al. [4] in der Komplexitätsklasse P. Dies gilt insbesondere für den Fall $s = 4$. Der Nachweis kann wie folgt erbracht werden: Die abgeschnittene Singulärwertzerlegung von D ist durch $D = U\Sigma V^T$ gegeben. Nun sind Matrizen $T_1 \in \mathbb{R}^{s \times s}$ und $T_2 \in \mathbb{R}^{s \times s}$ gesucht, sodass die Gleichungen

$$C = U\Sigma T_1 \geq 0, \quad A = T_2 V^T \geq 0, \quad \text{und} \quad T_1 T_2 = I \quad (6.1)$$

erfüllt sind. Dabei bezeichnet I die Einheitsmatrix im $\mathbb{R}^{s \times s}$ und die Ungleichungen sind komponentenweise zu verstehen. Die Einträge der Matrizen T_1 und T_2 können als $2s^2$ unbekannte reelle Zahlen aufgefasst werden, die die Gleichungs- und Ungleichungsbedingungen (6.1) erfüllen. Die Frage, ob zu diesem Ungleichungssystem eine zulässige Belegung existiert, entspricht der Frage nach Existenz einer nichtnegativen Faktorisierung von D . Weiterhin handelt es sich bei diesem Entscheidungsproblem um einen Spezialfall der Entscheidbarkeit der Theorie erster Ordnung der reellen Zahlen [50]. Basu et al. [8] zeigten, dass die Theorie erster Ordnung der reellen Zahlen in polynomieller Zeit entschieden werden kann und also in P liegt. Es folgt somit, dass die Entscheidungsfrage, ob eine nichtnegative Faktorisierung $D = CA$ mit $C \in \mathbb{R}^{k \times s}$ und $A \in \mathbb{R}^{s \times n}$ für eine fest gewählte Konstante s existiert, ebenfalls in P ist. Für den Fall, dass D eine Rang- s Matrix ist und s bekannt ist, geben Arora et al. die Komplexität des Entscheidungsproblems, ob es eine nichtnegative Rangfaktorisierung gibt, mit $\mathcal{O}((kn)^{s^2})$ an. Da s eine feste Konstante ist, ist die Komplexität polynomiell von den Anfangsdaten abhängig.

Zunächst scheint dieses Ergebnis von Vavasis [64], dass das Rangfaktorisierungsproblem NP -vollständig ist, den Aussagen von Arora et al. [4] zu widersprechen, dass die nichtnegative Matrixfaktorisierung für eine gegebene innere Dimension s in P liegt. Der Unterschied liegt jedoch darin, dass die innere Dimension der Matrizen in der Faktorisierung nach Vavasis nicht bekannt ist.

Nach der Aussage der Arbeit von [4] könnten Algorithmen existieren, mit denen die Menge der zulässigen Lösungen zu einer Matrix D vom Rang 4 analytisch berechnet werden kann. Bislang sind solche aber nicht bekannt. Daher soll im Folgenden der Strahlenalgorithmus angewendet werden, um die AFS von Rang-4-Matrizen numerisch zu bestimmen.

6.2 Der Strahlenalgorithmus unter Verwendung geometrischer Eigenschaften

Da eine Verallgemeinerung des Tangenten- oder line-moving Algorithmus für Matrizen D vom Rang 4 nicht ohne weiteres möglich ist, soll zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen in diesem Fall der Strahlenalgorithmus verwendet werden. Geometrische Eigenschaften der AFS werden dabei genutzt, um den Algorithmus zu beschleunigen. Das beschriebene Vorgehen zur Approximation der AFS lässt sich auf Matrizen höheren Ranges erweitern. Im Folgenden sei D aber eine Matrix vom Rang 4.

Wie in Kapitel 5.2.5 kurz dargestellt, werden vom Nullpunkt ausgehende äquiangulare Strahlen betrachtet und die Schnitte dieser Strahlen mit der Menge der zulässigen Lösungen bestimmt. Nach Lemma 3.16 liegt der Nullpunkt im inneren Polyeder $INNPOL$, wenn D eine nichtnegative und irreduzible Matrix ist. Wird die Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ zur verallgemeinerten nichtnegativen Matrixfaktorisierung betrachtet, wird im Folgenden davon ausgegangen, dass die Bedingungen von Lemma 3.23 erfüllt sind. Die genannten Lemmata 3.16 und 3.23 begründen, dass die Menge der zulässigen Lösungen approximiert werden kann, in dem ihr Schnitt mit Strahlen, die vom Nullpunkt ausgehen, betrachtet wird. Auf den jeweiligen Strahlen wird unter Verwendung eines Optimierungsansatzes nach Punkten der Menge der zulässigen Lösungen gesucht. Da für die Optimierung geeignete Startwerte benötigt werden, wird der Strahlenalgorithmus ausgehend von einer (verallgemeinerten) nichtnegativen Faktorisierung initialisiert. Dies ist im Folgenden Abschnitt dargestellt.

6.2.1 Initialisierung des Strahlenalgorithmus

Zunächst wird eine (verallgemeinerte) nichtnegative Matrixfaktorisierung von D berechnet. In MATLAB kann dazu die Funktion `nnmf` der Statistics Toolbox verwendet werden [45]. Diese basiert auf der Arbeit von Berry und Browne [10]. Eine Alternative ist etwa durch den Algorithmus von Kim und Park gegeben [36]. Der Strahlenalgorithmus wird nun ausgehend von der Faktorisierung $D = CA$ aufgebaut, um geeignete Startwerte für die Optimierungsaufgabe zu erhalten. Durch die Zeilen der Matrix A sind dann 4 Punkte in der Menge der zulässigen Lösungen gegeben. Diese können ermittelt werden, indem die Zeilen von A bezüglich der Hyperebene $w^T x = 1$ skaliert werden und anschließend die Anteile in Richtung des zweiten bis vierten rechten Singulärvektors bestimmt werden, vergleiche Kapitel 3.2.1. Dies führt auf die Berechnung der Punkte P_i , $1 \leq i \leq 4$ mittels der

Gleichungen

$$\tilde{A}(i, :) = \frac{A(i, :)}{A(i, :)\mathbf{w}},$$

$$P_i^T = \left(\tilde{A}(i, :)\mathbf{v}_2, \tilde{A}(i, :)\mathbf{v}_3, \tilde{A}(i, :)\mathbf{v}_4 \right).$$

Nun wird ein äquiangulares Strahlengitter konstruiert, sodass der Punkt P_1 auf einem der Strahlen liegt. Der Punkt P_1 sei in Kugelkoordinaten durch

$$P_1^T = (r \sin(\theta) \cos(\phi), r \sin(\theta) \sin(\phi), r \cos(\theta))$$

gegeben. Der Winkelabstand zwischen den Strahlen in einer horizontalen Ebene sei ϕ_s und der Winkelabstand zwischen den Azimutwinkeln sei θ_s . Dann sind der kleinste verwendete Polarwinkel ϕ_0 und der kleinste verwendete Azimutwinkel θ_0 durch

$$\theta_0 = \theta - \lfloor \theta / \theta_s \rfloor \quad \text{und} \quad \phi_0 = \phi - \lfloor \phi / \phi_s \rfloor$$

gegeben. Die Strahlen $\ell_{i,j}(r)$ sind nun durch

$$\ell_{i,j}(r) = \begin{pmatrix} r \sin(\theta_0 + i\theta_s) \cos(\phi_0 + j\phi_s) \\ r \sin(\theta_0 + i\theta_s) \sin(\phi_0 + j\phi_s) \\ r \cos(\theta_0 + i\theta_s) \end{pmatrix}, \quad r \geq 0$$

bestimmt. Dabei gilt $0 \leq i \leq \lfloor \pi / \theta_s \rfloor$ und $0 \leq j \leq \lfloor 2\pi / \phi_s \rfloor$.

Diese Initialisierung kann wie folgt zusammengefasst werden:

Schritt 1: Initialisierung

1. Berechne eine nichtnegative Faktorisierung $D = CA$.
2. Bestimme die Punkte P_1, P_2, P_3 und P_4 der AFS, die sich aus den Zeilen von A ergeben.
3. Bestimme die Winkel θ und ϕ zu dem Strahl, der ausgehend vom Nullpunkt durch P_1 verläuft.
4. Bestimme die Strahlen $\ell_{i,j}$ mit $0 \leq i \leq \lfloor \pi / \theta_s \rfloor$ und $0 \leq j \leq \lfloor 2\pi / \phi_s \rfloor$.

Es soll nun der Schnitt der Strahlen $\ell_{i,j}$ mit der Menge der zulässigen Lösungen ermittelt werden. Wie insbesondere der innere Rand der AFS numerisch bestimmt werden kann, ist in den nächsten Abschnitten dargestellt. Das Vorgehen ist anschließend in **Schritt 2** zusammengefasst.

6.2.2 Approximation des inneren und äußeren Randes der AFS

Die Menge der zulässigen Lösungen wird nun approximiert, indem die Schnitte der Strahlen $\ell_{i,j}$ mit der AFS bestimmt werden. Dies erfolgt unter Auswertung der Zielfunktion $f_Z(t, Q)$, die etwa durch $f_{\text{NMF}}(t, Q)$ (5.2) oder $f_{\text{geo}}(t, Q)$ (5.3) gegeben sein kann. Ausgehend von dem Gitterpunkt P_1 werden die Strahlen $\ell_{i,j}$ dazu spiralförmig durchlaufen, zunächst mit absteigenden i und j und dann mit aufsteigenden Indizes. Auf dem Strahl, der durch P_1 verläuft, sind die Startwerte durch die Ausgangsfaktorisierung in der Form

$$Q = \begin{pmatrix} P_2^T \\ P_3^T \\ P_4^T \end{pmatrix}$$

gegeben. Auf den weiteren Strahlen können die Werte verwendet werden, für die auf dem Nachbarstrahl das beste Ergebnis der Optimierung erreicht wurde. Dies begründet das spiralförmige Durchlaufen der Strahlen.

Zunächst wird der Schnitt des aktuell betrachteten Strahls mit dem Rand des Polyeders FIRPOL berechnet. Wenn auf einem Strahl Punkte liegen, die zur AFS gehören, so gehört nach Lemma 3.16 (beziehungsweise Lemma 3.23) auch der Schnitt mit FIRPOL zur Menge der zulässigen Lösungen. Der Schnittpunkt wird ermittelt, indem $r_F \in \mathbb{R}^+$ so bestimmt wird, dass $M\ell_{i,j}(r_F) \geq b$ gilt und in mindestens einer Komponente Gleichheit angenommen wird. Dabei sind M und b durch die Gleichungen

$$M = \left(v_2 - \frac{w^T v_2}{w^T v_1} v_1, \dots, v_s - \frac{w^T v_s}{w^T v_1} v_1 \right) \quad \text{und} \quad (6.2)$$

$$b = -\varepsilon_A - \frac{v_1}{w^T v_1}$$

gegeben, vergleiche Kapitel 5.1.2. Um r_F zu ermitteln, kann genutzt werden, dass nach Lemma 3.13 $r_F \geq 0$ gilt. In der RS-Skalierung gilt nach Lemma 3.10 zudem $r_F \leq 1$, sodass ausgehend von den Punkten $\ell_{i,j}(0)$ und $\ell_{i,j}(1)$ das Bisektionsverfahren verwendet werden kann. Anschließend wird überprüft, ob der Punkt $\ell_{i,j}(r_F)$ zur Menge der zulässigen Lösungen $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ gehört. Dazu wird das Minimum der Zielfunktion $f_Z(\ell_{i,j}(r_F), Q_{i,j})$ im Punkt $\ell_{i,j}(r_F)$ bestimmt. Dies kann mittels verschiedener Optimierungsmethoden umgesetzt werden. In den numerischen Beispielen in Abschnitt 6.3 wurde die FORTRAN-Routine NL2SOL [21] verwendet. Nimmt die Zielfunktion den Wert Null an, dann gehört der Punkt $\ell_{i,j}(r_F)$ zur AFS.

Die Matrix $Q_{i,j}$, die mittels des Optimierungsverfahren bestimmt wird und für die, die Zielfunktion minimal wird, wird für jeden Strahl $\ell_{i,j}$ gespeichert, um sie in nachfolgenden Iterationsschritt als Startwert verwenden zu können. Falls beim spiralförmigen Durchlaufen der Strahlen ausgehend vom Punkt P_1 der Wert der Zielfunktion auf dem Strahl $\ell_{i,j}$ größer als Null ist, aber auf dem Strahl $\ell_{i+1,j}$ oder $\ell_{i-1,j}$ bereits ein Punkt der AFS bestimmt wurde, können die Matrizen $Q_{i+1,j}$ oder $Q_{i-1,j}$ als alternative Wahl der Startwerte genutzt werden. Dieses Vorgehen kann zu einer Verbesserung der Approximation der AFS führen.

Gehört der Punkt $\ell_{i,j}(r_F)$ zur Menge der zulässigen Lösungen, so wird der kleinste Wert $r_i > 0$ gesucht, für den $\ell_{i,j}(r_i)$ zur AFS gehört. Diese Punkte entsprechen dem inneren Rand der AFS. Um r_i zu ermitteln, wird die Variable r ausgehend von r_F schrittweise verkleinert und erneut durch Minimierung der Zielfunktion entschieden, ob der Punkt $\ell_{i,j}(r)$ zur Menge der zulässigen Lösungen gehört. In der numerischen Berechnung wurde diese Verkleinerung durch Multiplikation mit dem Wert 0.99 realisiert. Eine sukzessive Verkleinerung von r erlaubt es, als Startwert der Minimierungsaufgabe die Matrix Q zu nutzen, für die im letzten Schritt der kleinste Werte der Zielfunktion angenommen wurde. Liegt der aktuell betrachtete Punkt auf dem Strahl jedoch zu weit vom letzten Punkt entfernt, ist es möglich, dass die Startwerte keine gute Näherung für ein Minimum der Zielfunktion liefern und das Verfahren daher nicht gegen das gesuchte Minimum konvergiert. Dies begründet die Wahl des relativ großen Faktors 0.99. Nachdem durch weitere Verkleinerung von r kein Punkt der AFS mehr gefunden wurde, kann r_i mittels Bisektion ausgehend von einem Punkt innerhalb der AFS und einem Punkt außerhalb der AFS, die beide auf dem Strahl $\ell_{i,j}$ liegen, ermittelt werden. Anstatt r in jedem Schritt durch Multiplikation mit 0.99 zu verkleinern und erneut zu überprüfen, ob der Punkt $\ell_{i,j}(r)$ zur Menge der zulässigen Lösungen gehört, kann eine geometrische Konstruktion genutzt werden, um r zu verkleinern. Dies Vorgehen wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

6.2.3 Geometrische Verbesserung und Nachiteration

Für die Konstruktion der Punkte $\ell_{i,j}(r_i)$ auf dem inneren Rand der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} können im ungestörten Fall neben der schrittweisen Verkleinerung des Radius r und dem Bisektionsverfahren auch die geometrischen Eigenschaften der AFS genutzt werden. Liefert die Zielfunktion $f_Z(R, Q)$ für den Punkt $R = \ell_{i,j}(r)$ und die Matrix Q den Wert Null, so liegen R , $P_1 = Q(1, :)^T$, $P_2 = Q(2, :)^T$ und $P_3 = Q(3, :)^T$ innerhalb der AFS. Nach Satz 3.15 schließt die konvexe Hülle von R , P_1 , P_2 und P_3 das innere Polyeder ein. Das Ziel ist es nun, die Punkte P_1 , P_2 und P_3 so zu verschieben, dass der Punkt R entlang des Strahles $\ell_{i,j}$ weiter in Richtung des Nullpunkts verschoben werden kann und INNPOL in der konvexen Hülle enthalten bleibt.

Zunächst wird überprüft, ob die Ebene, die durch die Punkte P_1 , P_2 und P_3 verläuft, das innere Polytop berührt. Da von der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} im ungestörten Fall ausgegangen wird, kann diese Ebene INNPOL nicht schneiden. Falls die Ebene INNPOL auch nicht berührt, wird die Ebene \mathcal{E} bestimmt, die parallel zu der Ebene durch P_1 , P_2 und P_3 verläuft, INNPOL berührt und den kleinsten Abstand zum den Punkten P_1 , P_2 und P_3 aufweist. Nun wird der Parameter $\lambda \in (0, 1)$ so bestimmt, dass die Punkte

$$\begin{aligned} S_1 &= \lambda R + (1 - \lambda)P_1 \\ S_2 &= \lambda R + (1 - \lambda)P_2 \\ S_3 &= \lambda R + (1 - \lambda)P_3, \end{aligned} \tag{6.3}$$

in der Ebene \mathcal{E} liegen. Ein Beispiel ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Nach Konstruktion schließt die konvexe Hülle der Punkt P , S_1 , S_2 und S_3 das Polyeder INNPOL ein. Beachte, dass für den Fall, dass die Ebene, die durch P_1 , P_2 und P_3 verläuft, INNPOL berührt keine Verschiebung der Punkte vorgenommen wird. In diesem Fall wird $S_1 = P_1$, $S_2 = P_2$ und $S_3 = P_3$ gesetzt.

Die Punkte S_1 , S_2 und S_3 sollen nun auf den Rand des Polytops FIRPOL verschoben werden, sodass sie in der Ebene \mathcal{E} enthalten sind und der aufgespannte Tetraeder das innere Polyeder INNPOL umschließt. Die so erhaltenen Punkte werden mit R_1 , R_2 und R_3 bezeichnet. Es gibt verschiedene Möglichkeiten diese Punkte zu wählen, eine ist durch

$$\begin{aligned} R_1 &= S_1 + \lambda_1(2S_1 - S_2 - S_3) \\ R_2 &= S_2 + \lambda_2(2S_2 - S_1 - S_3) \\ R_3 &= S_3 + \lambda_3(2S_3 - S_1 - S_2) \end{aligned} \tag{6.4}$$

gegeben. Dies entspricht einem Verschieben der Eckpunkte des Dreiecks $S_1S_2S_3$ entlang der verlängerten Seitenhalbierenden. Die Parameter λ_1 , λ_2 und λ_3 werden so bestimmt, dass R_1 , R_2 und R_3 auf dem Rand von FIRPOL liegen. Eine Veranschaulichung hierzu ist in Abbildung 6.1 gegeben.

Der Winkel zwischen der Berührebene an INNPOL, die durch R_1 und R_2 verläuft, und der Ebene \mathcal{E} ist nach Konstruktion kleiner als der Winkel zwischen der Berührebene an INNPOL, die durch S_1 und S_2 verläuft, und der Ebene \mathcal{E} . Analoges gilt für die weiteren Seiten der Dreiecke $R_1R_2R_3$ beziehungsweise $S_1S_2S_3$. Demnach ist der Schnittpunkt der entsprechenden Berührebenen mit dem Strahl $\ell_{i,j}$ dichter am Nullpunkt als der Punkt $\ell_{i,j}(r)$. Um den Punkt $\ell_{i,j}(r_i)$ zu approximieren, kann der Punkt R entlang des Strahls $\ell_{i,j}$ zum Nullpunkt verschoben werden, bis zum ersten Mal ein Schnitt mit einer der Berührebenen an INNPOL erreicht wird.

Diese Konstruktion erlaubt eine Verbesserung der Approximation des inneren Randes ohne den Optimierungsansatz zu verwenden. Die geometrische Konstruktion kann im Strahlalgorithmus im Anschluss an eine Minimierung der Zielfunktion für den Punkt $\ell_{i,j}(r)$

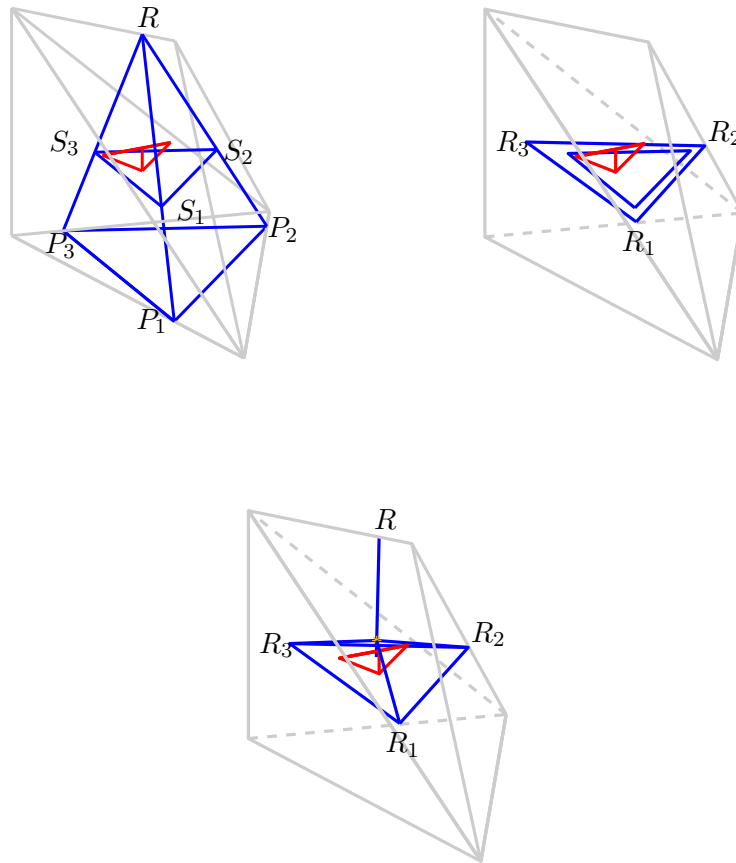


Abbildung 6.1: Beispiel für die geometrische Verbesserung der Approximation des inneren Randes der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} einer Matrix D vom Rang 4. Das innere Polyeder ist rot und das äußere Polyeder grau dargestellt. Oben links: Der Tetraeder $RP_1P_2P_3$ schließt das innere Polyeder ein. Die Ebene durch die Punkte P_1 , P_2 und P_3 wird parallel verschoben, bis sie das innere Polyeder berührt. Oben rechts: Das Dreieck, das INNPOL berührt wird vergrößert, sodass die Eckpunkte R_1 , R_2 und R_3 auf dem Rand des äußeren Polyeders liegen. Unten: Der Punkt R kann auf dem Strahl durch den Nullpunkt verschoben werden, sodass das Simplex $RR_1R_2R_3$ INNPOL umschließt.

genutzt werden, wenn $\ell_{i,j}(r)$ zur AFS gehört. Nach dieser Konstruktion wird

$$Q_{i,j} = \begin{pmatrix} R_1^T \\ R_2^T \\ R_3^T \end{pmatrix}$$

gesetzt, da die Punkte $\ell_{i,j}(r)$ und R_1, R_2, R_3 ein Tetraeder in FIRPOL aufspannen, das INNPOL enthält. Damit gilt für die Zielfunktionen $f_Z(\ell_{i,j}(r), Q_{i,j}) = 0$. Durch Multiplikation von r mit dem Faktor 0.99 und anschließender Betrachtung der Minimierungsaufgabe kann der innere Rand somit unter Verwendung von geometrischen Konstruktionen und des Optimierungsansatz approximiert werden. Die geometrische Verbesserung wird in Kapitel 6.3 weiter an einem numerischen Beispiel betrachtet.

In der Konstruktion treten jeweils Tetraeder auf, die das innere Polyeder umschließen. Diese Eigenschaft kann nur bei der Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} im ungestörten Fall verwendet werden. Die Konstruktion ist so aufgebaut, dass sowohl bei der Verschiebung der Punkte P_1, P_2 und P_3 zu S_1, S_2 und S_3 als auch zu R_1, R_2 und R_3 INNPOL in der konvexen Hülle von R und den jeweils drei weiteren Punkten enthalten bleibt. Wird nun aber die AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ der approximativ nichtnegativen Matrixfaktorisierung betrachtet, ist INNPOL nicht in der konvexen Hülle enthalten, sondern die Eckpunkte von INNPOL sind Affinkombinationen von vier Punkten in FIRPOL und die Entwicklungskoeffizienten in den Affinkombination sind nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt. Die vorgeschlagene geometrische Verbesserung führt in dem Fall nicht zwingend zu Punkten, die die Eigenschaften des Satzes 3.22 erfüllen.

Zunächst ist es dann möglich, dass die Ebene, die durch die Punkte P_1, P_2 und P_3 verläuft, INNPOL schneidet. Dann sollte keine Verschiebung der Punkte in die Berührebene \mathcal{E} an INNPOL vorgenommen werden, sondern wie im Fall, dass die Ebene durch P_1, P_2 und P_3 INNPOL berührt, verfahren werden. Es wird dann $S_1 = P_1, S_2 = P_2$ und $S_3 = P_3$ gesetzt.

Zudem kann ein Problem bei der Konstruktion der Punkte R_1, R_2 und R_3 auftreten. Dies soll an dem folgenden Beispiel verdeutlicht werden. Es seien ein Punkt R und die Punkte S_1, S_2 und S_3 gegeben, sodass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen dieser vier Punkte ist und die Entwicklungskoeffizienten in der Affinkombinationen größer oder gleich $-\varepsilon_C$ sind. Weiter wird angenommen, dass S_2 und S_3 auf dem Rand von FIRPOL liegen und es einen Eckpunkt \mathcal{I}_i von INNPOL gibt, dessen Darstellung als Affinkombination durch

$$\mathcal{I}_i = \alpha_1 S_1 + \alpha_2 S_2 + \alpha_3 S_3 + \alpha_4 R$$

ausgedrückt werden kann. Für die Koeffizienten soll dabei $-\varepsilon_C \leq \alpha_1 < 0, \alpha_2 = -\varepsilon_C, \alpha_3, \alpha_4 \geq -\varepsilon_C$ und $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 = 1$ gelten. Da S_2 und S_3 auf dem Rand von FIRPOL liegen, werden sie bei der weiteren Konstruktion nicht verschoben. Die Seitenhalbierenden des Dreiecks $S_1 S_2 S_3$, die durch S_1 verläuft, schneidet den Rand von FIRPOL im Punkt R_1 . Dann ist S_1 eine Konvexkombination von R_1, S_2 und S_3 und kann als

$$S_1 = \beta_1 R_1 + \beta_2 S_2 + \beta_3 S_3$$

dargestellt werden. Für die Koeffizienten gilt $\beta_1, \beta_2, \beta_3 \geq 0$ und $\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 = 1$. Damit ergibt sich für den Eckpunkt \mathcal{I}_i von INNPOL die Darstellung

$$\begin{aligned} \mathcal{I} &= \alpha_1 (\beta_1 R_1 + \beta_2 S_2 + \beta_3 S_3) + \alpha_2 S_2 + \alpha_3 S_3 + \alpha_4 R \\ &= \alpha_1 \beta_1 R_1 + (\alpha_2 + \alpha_1 \beta_2) S_2 + (\alpha_3 + \alpha_1 \beta_3) S_3 + \alpha_4 R. \end{aligned}$$

Für den Koeffizienten vor S_2 gilt nun aber $(\alpha_2 + \alpha_1\beta_2) < \varepsilon_C$, sodass \mathcal{I}_i keine Affinkombination von R_1, S_2, S_3 und R ist, in der die Entwicklungskoeffizienten nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind.

Die geometrische Konstruktion kann für den Fall der verallgemeinerten AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ aber dennoch angewendet werden, wenn in jedem Schritt überprüft wird, ob die Bedingungen an die Linearkoeffizienten in den Affindarstellungen erfüllt sind. Ist dies der Fall werden ausgehend von den Strecken R_1R_2, R_1R_3 und R_2R_3 in der gegebenen Reihenfolge die Berührebenen an die Mengen

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{R_1R_2} &= \left\{ \frac{S + \varepsilon_C R_3}{1 + \varepsilon_C}, S \in \mathcal{I} \right\}, \\ \mathcal{I}_{R_1R_3} &= \left\{ \frac{S + \varepsilon_C R_2}{1 + \varepsilon_C}, S \in \mathcal{I} \right\}, \\ \mathcal{I}_{R_2R_3} &= \left\{ \frac{S + \varepsilon_C R_1}{1 + \varepsilon_C}, S \in \mathcal{I} \right\}\end{aligned}\tag{6.5}$$

bestimmt, vergleiche Abschnitt 4.3.1 zum mathematischen Hintergrund des line-moving Algorithmus und insbesondere die Gleichungen (4.8) und (4.9). Mit \mathcal{I} wird die Menge der Eckpunkte von INNPOL bezeichnet. Der Punkt R wird nun entlang des Strahls $\ell_{i,j}$ in Richtung des Nullpunktes verschoben, bis ein Schnittpunkt mit den oben gegebenen Berührebenen erreicht ist.

Die Approximation von Punkten auf dem inneren Rand der AFS kann daher wie folgt zusammengefasst werden:

Schritt 2: *Approximation des inneren Randes*

- Falls noch kein Punkt $\ell_{i,j}(r)$ auf dem Strahl bekannt ist, der zur AFS gehört, bestimme den Schnittpunkt $\ell_{i,j}(r_F)$ des Strahls $\ell_{i,j}$ mit dem Polyeder FIRPOL. Es gilt $M\ell_{i,j}(r_F) \geq b$ und in mindestens einer Komponente wird Gleichheit angenommen, vergleiche Gleichung (6.2). Setze $r = r_F$.
- Bestimme durch Optimierung eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, für die $f_Z(\ell_{i,j}(r), Q)$ minimal wird. Gilt $f_Z(\ell_{i,j}(r), Q) = 0$, gehört $\ell_{i,j}(r)$ zur AFS.
 1. Falls $R = \ell_{i,j}(r)$ zur AFS gehört, setze $r_i = r$, $P_1 = Q(1, :)^T$, $P_2 = Q(2, :)^T$ und $P_3 = Q(3, :)^T$.
 2. Konstruiere die Punkte S_1, S_2 und S_3 entsprechend Gleichung (6.3). Beachte, dass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von R, S_1, S_2, S_3 sein sollen und die Linearkoeffizienten in der Affinkombination nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind.
 3. Konstruiere die Punkte R_1, R_2 und R_3 entsprechend Gleichung (6.4). Beachte, dass die Eckpunkte von INNPOL Affinkombinationen von R, R_1, R_2, R_3 sein sollen und die Linearkoeffizienten in der Affinkombination nach unten durch $-\varepsilon_C$ beschränkt sind.
 4. Bestimme die Berührebenen an das innere Polyeder, beziehungsweise (im Fall der approximativ nichtnegativen Matrixfaktorisierung) an die Mengen, die in Gleichung (6.5) gegeben sind.
 5. Verschiebe R entlang des Strahls $\ell_{i,j}$ in Richtung des Nullpunkts bis zu dem Schnittpunkt mit einer der Berührebenen, der den größten Abstand zum Nullpunkt hat. Aktualisiere r , sodass $R = \ell_{i,j}(r)$ gilt.

6. Setze $Q_{i,j} = (R_1, R_2, R_3)^T$.
 7. Setze $r = 0.99r$.
 8. Bestimme durch Optimierung eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, für die $f_Z(\ell_{i,j}(r), Q)$ minimal wird. Gilt $f_Z(\ell_{i,j}(r), Q) = 0$, fahre mit 1. fort.
- Falls r_F zur AFS gehört, bestimme den inneren Rand der AFS durch Bisektion zwischen r und r_i .

Eine weitere Verbesserung der Ergebnisse kann erreicht werden, wenn die Strahlen $\ell_{i,j}$ mehrmals durchlaufen werden. Für den Startwert der Optimierungsaufgabe auf einem Strahl kann dann jeweils der Wert verwendet werden, für den in der letzten Iteration der kleinste Wert der Zielfunktion auf einem der Nachbarstrahlen erreicht wurden. Dabei können für den Strahl $\ell_{i,j}$ mit $0 < i < \lfloor \pi/\theta_s \rfloor$ und $0 < j < \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$ die Matrizen $Q_{i-1,j}, Q_{i+1,j}, Q_{i,j-1}$ oder $Q_{i,j+1}$ verwendet werden. Für den Fall $j = 1$ existieren keine entsprechenden Werte zu $Q_{i,j-1}$. Ebenso kann für $j = \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$ nicht auf $Q_{i,j+1}$ zurückgegriffen werden. Für $i = 1$ wird statt $Q_{i-1,j}$ die Matrix $Q_{\lfloor \pi/\theta_s \rfloor, j}$ genutzt. Und für $i = \lfloor \pi/\theta_s \rfloor$ wird statt auf $Q_{i+1,j}$ auf $Q_{1,j}$ zurückgegriffen.

Bei der Nachiteration werden die Strahlen in der Reihenfolge durchlaufen, dass die Ergebnisse eines verbesserten Punktes auch im nächsten Strahl verwendet werden. Dies bedeutet, dass wenn für die Startwerte die Ergebnisse zum Strahl $S_{i-1,j}$ verwendet werden, dann wird zunächst der Azimutwinkel fixiert und der Polarwinkel vergrößert. Werden als Startwerte die Ergebnisse $S_{i+1,j}$ genutzt, wird analog der Polarwinkel verkleinert. Für die Startwerte zu den Matrizen $S_{i,j-1}$ und $S_{i,j+1}$ werden die Strahlen ebenenweise durchlaufen, im ersten Fall mit wachsendem und zweitem Fall absteigendem Azimutwinkel. Wird mehrfach nachiteriert ist es praktikabel die Reihenfolge, in der die Strahlen durchlaufen werden jeweils zu verändern. Die Matrizen $Q_{i,j}$ sind bei diesem Vorgehen jeweils zu aktualisieren.

Die Nachiteration verbessert die Genauigkeit der Approximation der AFS. Bei der Verwendung des Optimierungsansatzes zur Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen wird zu einem festen Punkt R ein Minimum der Zielfunktionen f_Z bestimmt. Es ist dabei jedoch nicht klar, ob das globale Minimum gefunden wurde. Wurde jedoch bereits ein Punkt $\ell_{i,j}(r_i)$ des inneren Randes bestimmt, wird angenommen, dass durch $Q_{i,j}$ geeignete Startwerte für die Approximation des inneren Randes auf den benachbarten Strahlen gegeben sind. Dies begründet die Bedeutung der Nachiteration. Eine Möglichkeit die Nachiteration zu realisieren ist in Algorithmus 3 angegeben.

6.2.4 Zusammenfassung des Algorithmus

Die in den vorherigen Abschnitten beschriebenen Vorgehensweisen zur Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen einer Matrix D vom Rang 4 sind in den Algorithmen 2 und 3 als Pseudocode dargestellt. Die Algorithmen basieren auf dem Strahlenalgorithmus, vergleiche Abschnitt 5.2.5 und [58]. Es wurde für die Approximation des inneren Randes der AFS eine geometrische Verbesserung vorgeschlagen, die für den ungestörten Fall \mathcal{M} ohne Einschränkungen eingesetzt werden kann. Im Fall der AFS $\mathcal{M}_{\varepsilon_C, \varepsilon_A}$ der approximativ nichtnegativen Matrixfaktorisierung kann die geometrische Verbesserung genutzt werden, wenn jeweils überprüft wird, ob für das innere Polyeder die Bedingungen des Satzes 3.22 erfüllt sind. Die Variable n_{it} gibt in Algorithmus 3 die Anzahl der Nachiterationen an. Die Matrix M und der Vektor b sind, wie in Gleichung (6.2) gegeben.

Algorithmus 2 Der Strahlenalgorithmus für Matrizen D vom Rang 4

Eingabe: INNPOL, ϕ_s , θ_s , M , b (vergleiche Gleichung (6.2))

Schritt 1 \rightarrow Berechne eine Ausgangsfaktorisierung, bestimme die Punkte P_1, P_2, P_3, P_4 und erzeuge das Strahlengitter, $\ell_{i,j}, 0 \leq i \leq \lfloor \pi/\theta_s \rfloor, 0 \leq j \leq \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$,

ℓ_{i_0,j_0} ist der Strahl durch den Punkt P_1 zur Ausgangsfaktorisierung.

$Q = (P_2, P_3, P_4)^T \rightarrow$ Startwert für Optimierung in Schritt 2

for $i = i_0 : -1 : 0$ **do**

$j = j_0$

for $h = 0 : \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$ **do**

Schritt 2 \rightarrow Entscheide ob auf $\ell_{i,j}$ Punkte der AFS liegen, approximiere den inneren Rand, bestimme $Q_{i,j}$.

$Q = Q_{i,j}$

$j = j - 1$

if $j = -1$ **then**

$j = \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$

end if

end for

end for

$Q = Q_{i_0,j_0} \rightarrow$ Startwert für Optimierung in Schritt 2

for $i = i_0 : \lfloor \pi/\theta_s \rfloor$ **do**

$j = j_0 + 1$

for $h = 0 : \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$ **do**

Schritt 2 \rightarrow Entscheide ob auf $\ell_{i,j}$ Punkte der AFS liegen, approximiere den inneren Rand, bestimme $Q_{i,j}$.

$Q = Q_{i,j}$

$j = j + 1$

if $j > \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$ **then**

$j = 0$

end if

end for

end for

Nachiteration \rightarrow Algorithmus 3

Algorithmus 3 Nachiteration im Strahlenalgorithmus

Eingabe: INNPOL, n_{it} , $\ell_{i,j}$, $Q_{i,j}$ für $0 \leq i \leq \lfloor \pi/\theta_s \rfloor, 0 \leq j \leq \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$

```
for  $h = 1 : n_{it}$  do
  if  $\text{mod}(h, 4) = 1$  then
    for  $i = 0 : \lfloor \pi/\theta_s \rfloor$  do
       $Q = Q_{i, \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor} \rightarrow$  Startwert für Optimierung in Schritt 2
      for  $j = 0 : \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$  do
        Schritt 2  $\rightarrow$  Approximiere den inneren Rand von  $\ell_{i,j}$ ,
        bestimme  $Q_{i,j}$ .
         $Q = Q_{i,j}$ 
      end for
    end for
  end if

  if  $\text{mod}(h, 4) = 2$  then
    for  $j = 0 : \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor$  do
       $Q = Q_{0,j}(1, :) \rightarrow$  Startwert für Optimierung in Schritt 2
      for  $i = 1 : \lfloor \pi/\theta_s \rfloor$  do
        Schritt 2  $\rightarrow$  Approximiere den inneren Rand von  $\ell_{i,j}$ ,
        bestimme  $Q_{i,j}$ .
         $Q = Q_{i,j}$ 
      end for
    end for
  end if

  if  $\text{mod}(h, 4) = 3$  then
    for  $i = \lfloor \pi/\theta_s \rfloor : -1 : 0$  do
       $Q = Q_{i,0} \rightarrow$  Startwert für Optimierung in Schritt 2
      for  $j = \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor : -1 : 0$  do
        Schritt 2  $\rightarrow$  Approximiere den inneren Rand von  $\ell_{i,j}$ ,
        bestimme  $Q_{i,j}$ .
         $Q = Q_{i,j}$ 
      end for
    end for
  end if

  if  $\text{mod}(h, 4) = 0$  then
    for  $j = \lfloor 2\pi/\phi_s \rfloor : -1 : 0$  do
       $Q = Q_{\lfloor \pi/\theta_s \rfloor, j} \rightarrow$  Startwert für Optimierung in Schritt 2
      for  $i = \lfloor \pi/\theta_s \rfloor - 1 : -1 : 0$  do
        Schritt 2  $\rightarrow$  Approximiere den inneren Rand von  $\ell_{i,j}$ ,
        bestimme  $Q_{i,j}$ .
         $Q = Q_{i,j}$ 
      end for
    end for
  end if
end for
```

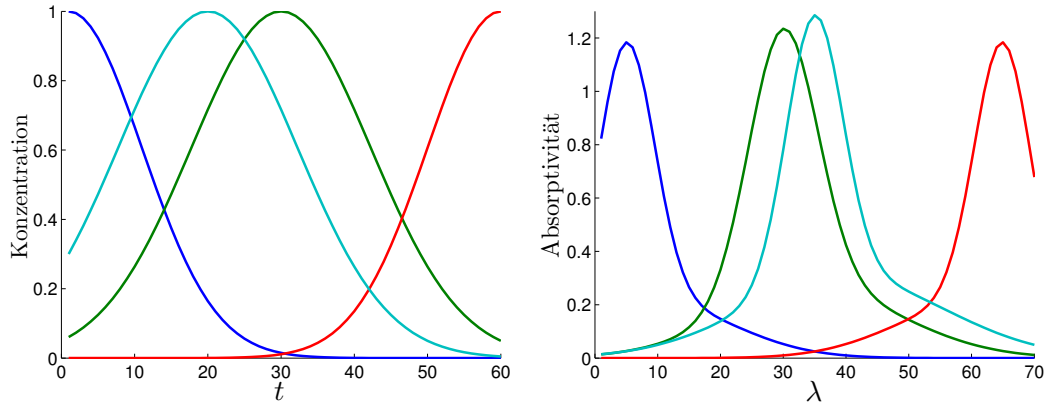


Abbildung 6.2: Darstellung des Modellproblems zu den Gleichungen (6.6) und (6.7). Links: Darstellung der Spalten der Matrix C . Rechts: Darstellung der Zeilen von A .

6.3 Ein numerisches Beispiel

Eine nichtnegative Matrix D vom Rang 4, deren Menge der zulässigen Lösungen durch den Strahlenalgorithmus numerisch bestimmt werden soll, wird durch das folgende Modellproblem konstruiert. Die Zeilen des Faktors A ergeben sich aus den Diskretisierungen der Funktionen.

$$\begin{aligned} a_1(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda-5)^2}{40}\right) + 0.2 \exp\left(-\frac{(\lambda-10)^2}{300}\right), \\ a_2(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda-30)^2}{60}\right) + 0.25 \exp\left(-\frac{(\lambda-35)^2}{400}\right), \\ a_3(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda-65)^2}{40}\right) + 0.2 \exp\left(-\frac{(\lambda-60)^2}{300}\right), \\ a_4(\lambda) &= \exp\left(-\frac{(\lambda-35)^2}{40}\right) + 0.3 \exp\left(-\frac{(\lambda-40)^2}{500}\right). \end{aligned} \tag{6.6}$$

Dabei sei $A \in \mathbb{R}^{4 \times 70}$ und die Matrixeinträge sind durch $A(i, j) = a_i(j)$ gegeben. Die Spalten des Matrixfaktors C sind durch Diskretisierungen der Funktionen

$$\begin{aligned} c_1(t) &= \exp\left(-\frac{(t-1)^2}{200}\right), \\ c_2(t) &= \exp\left(-\frac{(t-30)^2}{300}\right), \\ c_3(t) &= \exp\left(-\frac{(t-60)^2}{200}\right), \\ c_4(t) &= \exp\left(-\frac{(t-20)^2}{300}\right) \end{aligned} \tag{6.7}$$

gegeben. Die Einträge der Matrix $C \in \mathbb{R}^{60 \times 4}$ entsprechen $C(i, j) = c_j(i)$. Darstellungen zu den Matrizen C und A sind in Abbildung 6.2 gegeben. Die Matrix D ergibt sich nun als $D = CA$.

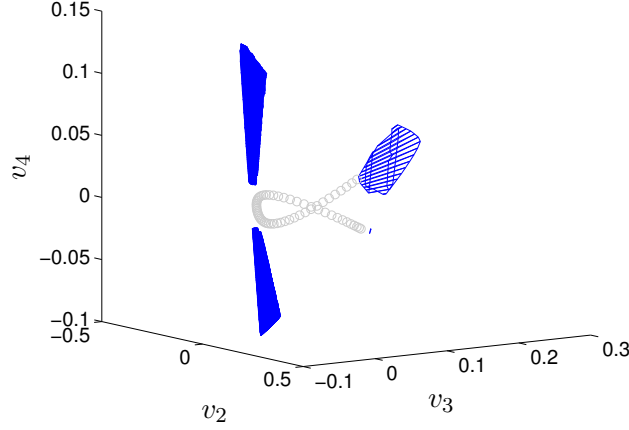


Abbildung 6.3: Darstellung der AFS des Modellproblems zu den Gleichungen (6.6) und (6.7) in der RS-Skalierung. Die grauen Punkte sind durch die niedrigdimensionale Darstellung der Zeilen von D gegeben. Die konvexe Hülle dieser Punkte bildet das Polyeder INNPOL. Die mittels des Strahlenalgorithmus approximierten Segmente der AFS sind blau dargestellt. Zur Approximation wurde $\phi_s = \theta_s = \pi/180$ gewählt und es wurden 8 Nachiterationen durchgeführt.

Die Menge der zulässigen Lösungen \mathcal{M} zur Matrix D besteht im ungestörten Fall aus 4 Zusammenhangskomponenten. Eine Approximation dieser Menge mittels des Strahlenalgorithmus ist in Abbildung 6.3 dargestellt.

Zur Approximation der AFS wurden die Zielfunktionen f_{NMF} (5.2) und f_{geo} (5.3) verwendet. Die Zielfunktion f_{NMF} erzwingt die Nichtnegativität der Matrixfaktoren C und A , die, wie in Bemerkung 2.13 beschrieben, ausgehend von der abgeschnittenen Singulärwertzerlegung bestimmt werden. Die Zielfunktion f_{geo} basiert auf der geometrischen Beschreibung der Menge der zulässigen Lösungen, vergleiche die Sätze 3.15 und 3.22. Die Berechnungen wurden mit variierenden Anzahlen an Nachiterationen und jeweils mit und ohne die geometrische Verbesserung durchgeführt. Als Diskretisierungsparameter wurden $\phi_s = \theta_s = \pi/180$ verwendet und die Strahlengitter wurden jeweils ausgehend von derselben Anfangsfaktorisierung $D = CA$ bestimmt. In den Tabellen 6.1 und 6.2 sind für die einzelnen Fälle die Gesamtrechnenzeiten sowie die Anzahl der Strahlen, auf denen Punkte der AFS bestimmt wurden, angegeben.

Tabelle 6.1 zeigt, dass im Strahlenalgorithmus unter Verwendung der Zielfunktion f_{NMF} die Rechenzeiten kürzer werden, wenn die geometrische Verbesserung für die Approximation des inneren Randes verwendet wird. Die Anzahl der Strahlen, auf denen Punkte der AFS gefunden wurden, nimmt durch die geometrische Nachiteration erst bei mehrfacher Nachiteration merklich zu.

Wird der Strahlenalgorithmus unter Verwendung der geometrischen Zielfunktion f_{geo} betrachtet, nimmt die Rechenzeit durch die geometrische Verbesserung ebenfalls ab und auf mehr Strahlen werden Punkte der AFS bestimmt, vergleiche Tabelle 6.2. Anders als bei der Verwendung der Zielfunktion f_{NMF} werden durch die geometrische Verbesserung bereits ohne Nachiteration deutlich mehr Punkte der AFS gefunden.

Ein Vergleich der Ergebnisse für die verschiedenen Zielfunktionen ohne geometrische Verbesserung zeigt, dass unter Verwendung der Funktion f_{NMF} mehr Punkte der AFS gefunden

Nachiterationen	ohne geom. Verbesserung		mit geom. Verbesserung	
	Rechenzeit in s	Anzahl Strahlen	Rechenzeit in s	Anzahl Strahlen
0	1768	5230	1461	5234
1	2381	5561	2197	5387
2	3173	5816	2859	5930
4	4888	6015	4498	6235

Tabelle 6.1: Ergebnisse des Strahlenalgorithmus für das Modellproblems zu den Gleichungen (6.6) und (6.7) unter Verwendung der Zielfunktion f_{NMF} (5.2). Für verschiedene Anzahlen der Nachiteration sind die Rechenzeiten und die Anzahlen der Strahlen, auf denen Punkte der AFS bestimmt wurden, angegeben. Es sind jeweils die Ergebnisse mit und ohne geometrischer Verbesserung im Strahlenalgorithmus dargestellt.

Nachiterationen	ohne geom. Verbesserung		mit geom. Verbesserung	
	Rechenzeit in s	Anzahl Strahlen	Rechenzeit in s	Anzahl Strahlen
0	1388	3400	1262	5694
1	1890	3742	1782	5800
2	2669	4496	2584	6036
4	3735	5003	3602	6425

Tabelle 6.2: Ergebnisse des Strahlenalgorithmus für das Modellproblems zu den Gleichungen (6.6) und (6.7) unter Verwendung der Zielfunktion f_{geo} (5.3). Für verschiedene Anzahlen der Nachiteration sind die Rechenzeiten und die Anzahlen der Strahlen, auf denen Punkte der AFS bestimmt wurden, angegeben. Es sind jeweils die Ergebnisse mit und ohne geometrischer Verbesserung im Strahlenalgorithmus dargestellt.

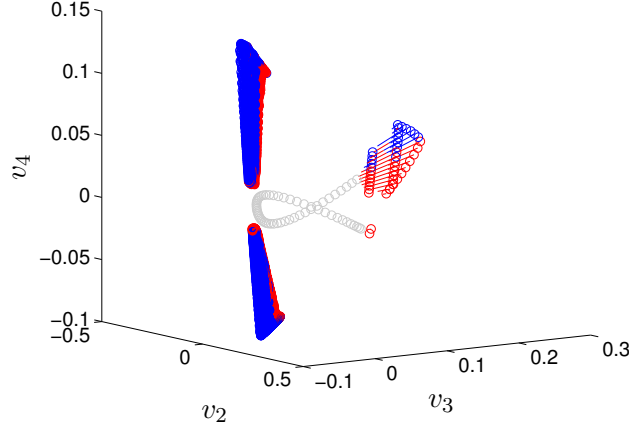


Abbildung 6.4: Darstellung zur Approximation der AFS des Modellproblems zu den Gleichungen (6.6) und (6.7) in der RS-Skalierung mittels des Strahlenalgorithmus unter Verwendung der Zielfunktion f_{geo} . Für die Diskretisierungsparameter wurden $\phi_s = \theta_s = \pi/180$ gewählt. Die blauen Strahlen zeigen das Ergebnis ohne Nachiteration. Die roten Strahlen zeigen das Ergebnis mit 8 Nachiterationen. Die Schnittpunkte der Strahlen mit dem äußeren Polyeder FIRPOL sind zudem mit einem Kreis markiert. Diese Punkte entsprechen der Approximation des äußeren Randes der AFS.

werden als mittels der Funktion f_{geo} . Allerdings sind auch die Rechenzeiten in diesem Fall höher. Selbst bei vierfachem Nachiterieren werden mittels f_{geo} weniger Punkte der AFS bestimmt als mittels der Funktion f_{NMF} ohne Nachiteration. Werden jedoch die Ergebnisse für die beiden Zielfunktion unter Verwendung der geometrischen Verbesserung betrachtet, wird deutlich, dass die Rechenzeiten für die Funktion f_{geo} kürzer sind und mehr Punkte der AFS bestimmt werden. Die besten Ergebnisse hinsichtlich der Rechenzeit und Approximationsgüte liefert somit die Zielfunktion f_{geo} mit der Anwendung der geometrischen Verbesserung.

Die geometrische Verbesserung wirkt sich auf die Approximationsgüte bei Verwendung der geometrischen Zielfunktion f_{geo} deutlich stärker aus als im Fall der Zielfunktion f_{NMF} . Dies kann damit begründet werden, dass durch die geometrische Verbesserung, die Eckpunkte des Tetraeders, das INNPOL enthält, so verändert werden, dass eine Konvergenz des Optimierungsverfahren in einem lokalen Minimum verhindert wird.

Abbildung 6.4 zeigt die Bedeutung der Nachiteration für die Approximationsgüte der AFS im Strahlenalgorithmus. Nach einem Durchlauf aller Strahlen beginnend bei einer Ausgangsfaktorisierung liegt für einen Teil der Strahlen eine gute Approximation des inneren Randes vor. Bei der Nachiteration werden die Punkte der Nachbarstrahlen, für die der kleinste Wert der Zielfunktion erreicht wurde, als Startwert für die Optimierungsaufgabe genutzt. Durch dieses Vorgehen werden die Startwerte verbessert, sodass die Approximationsgenauigkeit des inneren Randes erhöht wird. In Abbildung 6.4 sind die Approximation der AFS im Strahlenalgorithmus unter Verwendung der Zielfunktion f_{geo} ohne Nachiteration und mit 8 Nachiterationen dargestellt. Es ist jedoch zu beachten, dass mit jeder Nachiteration auch die Rechenzeit deutlich zunimmt.

6.4 Fazit

Für die Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen von Rang-4-Matrizen ist, anders als im Fall von Rang-2- und Rang-3-Matrizen, bislang keine analytische Methode bekannt. Es wurde jedoch gezeigt, dass die Entscheidung, ob eine nichtnegative Rangfaktorisierung zu einer Matrix vom Rang 4 existiert, in der Komplexitätsklasse P liegt [4]. Daher kann nicht ausgeschlossen werden, dass es effiziente analytische Algorithmen zur Konstruktion der Menge der zulässigen Lösungen gibt. Ein Algorithmus, der die AFS geometrisch bestimmt oder der Beweis, dass ein solcher nicht existiert, wären von Interesse.

Zur Approximation der AFS von Rang-4-Matrizen wurde in diesem Kapitel der Strahlenalgorithmus verwendet und eine geometrische Verbesserung vorgeschlagen. Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass durch diese zusätzliche geometrische Konstruktion sowohl die Rechenzeit als auch die Approximationsgenauigkeit im Strahlenalgorithmus verbessert werden. Weiter wurden die besten Rechenzeiten und Approximationsgenauigkeiten bei der Verwendung der Zielfunktion f_{geo} (5.3) erreicht, die ausgehend von den geometrischen Eigenschaften der Menge der zulässigen Lösungen definiert ist, vergleiche Abschnitt 5.1.2.

Der Strahlenalgorithmus könnte dahingehend erweitert werden, dass auch Punkt- und Liniensegmente der AFS approximiert werden. In dem Strahlengitter könnten dazu die Strahlen ergänzt werden, auf denen die Punkte der AFS liegen, die zur Ausgangsfaktorisierung gehören. Wenn auf den benachbarten Strahlen des betrachteten Gitters zu einem der Punkte kein Punkt der AFS gefunden wurde, kann untersucht werden, ob der Punkt zu einem Liniensegment der AFS gehört. Dazu wird mittels eines Optimierungsverfahrens auf der Oberfläche des Polytops FIRPOL nach weiteren Punkten der AFS gesucht. Die erweiterte Konstruktion für Liniensegmente wurde von Sawall und Neymeyr in [58] beschrieben. Es ist zu beachten, dass die beschriebenen Konstruktionen von Punkten ausgehen, die durch eine Anfangsfaktorisierung gegeben sind. Liegt aber beispielsweise eine AFS vor, die aus mehr als 4 Punktsegmenten besteht, werden durch das beschriebene Vorgehen in der Mehrzahl der Fälle nur 4 Segmente gefunden. Im folgenden Kapitel wird bewiesen, dass es tatsächlich nichtnegative Matrizen D vom Rang 4 gibt, für die die Menge der zulässigen Lösungen aus mehr als 4 Punktsegmenten besteht. Dies zeigt erneut die Bedeutung eines analytischen Lösungsverfahrens.

7 Die Topologie der Menge zulässiger Lösungen

In diesem Kapitel soll die topologische Struktur der Menge zulässiger Lösungen \mathcal{M} für Rang-3- und Rang-4-Matrizen näher untersucht werden. Für Matrizen vom Rang 2 ist die Menge der zulässigen Lösungen nach Satz 3.15 zwischen den Intervallen INNPOL und FIRPOL eingebettet. Es ergeben sich somit genau zwei Intervalle, die auch zu einzelnen Punkten entartet sein können.

Für Rang-3-Matrizen existieren mehrere Möglichkeiten, aus wie vielen Zusammenhangskomponenten die AFS bestehen kann. Aus der Literatur sind Beispiele für Mengen zulässiger Lösungen \mathcal{M} mit einer oder mit drei Zusammenhangskomponenten bekannt, vergleiche die Abbildung 3.4. Es kann gezeigt werden, dass, falls die Menge zulässiger Lösungen nicht leer ist, sie entweder aus einer oder $3m, m \in \mathbb{N}$ Zusammenhangskomponenten besteht. Zudem können nichtnegative Matrizen D vom Rang 3 angegeben werden, für die die Menge der zulässigen Lösungen genau $3m$ Zusammenhangskomponenten aufweist. In der Anwendung für spektroskopische Messdaten sind jedoch die Fälle von einer oder drei Zusammenhangskomponenten typisch und es wurden bisher keine Beispiele beschrieben, in denen mehr als drei Zusammenhangskomponenten auftreten.

Weiter werden verschiedene topologische Strukturen angegeben, die sich für die Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen vom Rang 4 ergeben können. Dazu wird die Menge möglicher Eckpunkte von Tetraedern betrachtet, die zwischen zwei Polyedern eingebettet sind. Entsprechen diese Polyeder INNPOL und FIRPOL zu einer Matrix D in einer gegebenen Skalierung, dann entspricht diese Menge nach Satz 3.15 gerade der AFS.

7.1 Topologische Struktur der Menge zulässiger Lösungen von Rang-3-Matrizen

Um die topologische Struktur der Menge der zulässigen Lösungen von Rang-3-Matrizen zu untersuchen, werden zunächst ineinander liegende Polygone und die Menge der zwischen ihnen eingebetteten Dreiecke betrachtet. Wenn die Polygone durch INNPOL und FIRPOL einer Matrix D vom Rang 3 gegeben sind, entspricht die Menge der Eckpunkte der Dreiecke nach Satz 3.15 gerade der zugehörigen AFS. Auf diese Weise wird gezeigt, dass die Menge der zulässigen Lösungen zu Matrizen vom Rang 3 leer ist oder aus einer oder $3m$ Zusammenhangskomponenten bestehen kann.

7.1.1 Mögliche topologische Strukturen der Menge zulässiger Lösungen

Zur Analyse der Topologie der AFS, werden zwei Fälle unterschieden. Im ersten Fall liegen Punkte von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL. Im zweiten Fall ist das Polygon INNPOL komplett im Inneren von FIRPOL enthalten.

Lemma 7.1. *Zu einer nichtnegativen Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang 3 sind die Polygone INNPOL und FIRPOL gegeben. Liegt eine Kante von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL, so ist die AFS leer oder besteht aus genau drei Zusammenhangskomponenten.*

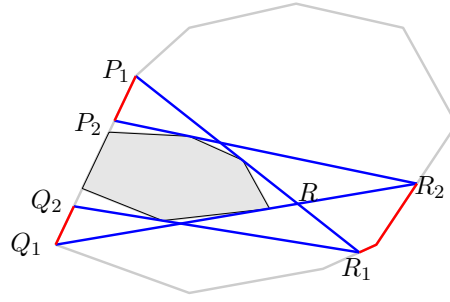


Abbildung 7.1: Konstruktion der AFS, wenn eine Kante von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL liegt.

Beweis. Damit ein Dreieck, das in FIRPOL liegt, das Polygon INNPOL umschließt, müssen zwei Ecken des Dreiecks auf derselben Kante von FIRPOL liegen, auf der auch die Schnittkante mit INNPOL liegt. Damit ergeben sich zwei Zusammenhangskomponenten der AFS, die Linien- oder Punktsegmente sind. Ein Beispiel ist in Abbildung 7.1 gegeben. Die Eckpunkte dieser Kante seien P_1 und Q_1 . Ausgehend von P_1 und Q_1 werden die Tangenten an INNPOL bestimmt (die nicht durch die betrachtete Kante verlaufen). Die Schnittpunkte der Tangenten mit FIRPOL werden als R_1 und R_2 bezeichnet. Falls die beiden Tangenten einander schneiden, wird der Schnittpunkt mit R bezeichnet und die AFS ist nicht leer. Andernfalls kann die Konstruktion abgebrochen werden, da kein Dreieck existieren kann, das in FIRPOL liegt und INNPOL umschließt. Die AFS ist in diesem Fall leer.

Falls R existiert, werden ausgehend von R_1 und R_2 die weiteren Tangenten an INNPOL bestimmt. Die Schnittpunkte der Tangenten mit FIRPOL liegen auf der Kante, die auch INNPOL berührt. Diese Schnittpunkte werden entsprechend Abbildung 7.1 mit P_2 und Q_2 bezeichnet. Die beiden ersten Segmente der AFS sind dann die Strecken P_1P_2 sowie Q_1Q_2 . Wenn P_1 und P_2 beziehungsweise Q_1 und Q_2 zusammenfallen, treten Punktsegmente auf. Das dritte Segment der AFS ist ein konvexes Polygon, dessen Rand durch den Polygonzug R_1RR_2 und den Rand von FIRPOL begrenzt ist. \square

Lemma 7.2. *Zu einer nichtnegativen Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang 3 sind die Polygone INNPOL und FIRPOL gegeben. Liegt ein Eckpunkt von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL, so ist die AFS leer oder besteht aus einer, drei oder sechs Zusammenhangskomponenten.*

Beweis. Der Fall, dass eine Kante von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL liegt, kann nach Lemma 7.1 ausgeschlossen werden. Zunächst wird der Fall untersucht, dass der Eckpunkt von INNPOL, der auf dem Rand von FIRPOL liegt, zur AFS gehört. Dieser Punkt sei mit R bezeichnet. In Abbildung 7.2 ist dies oben links dargestellt. Es werden die Verlängerungen der Kanten von INNPOL, die an diese Ecke stoßen, konstruiert. Die Schnittpunkte mit FIRPOL sind P_1 und Q_1 . Ausgehend von P_1 wird die zweite Tangente an INNPOL konstruiert. Der Schnittpunkt mit FIRPOL ist Q_2 . Ebenso wird ausgehend von Q_1 eine Tangente an INNPOL und ihr Schnittpunkt P_2 mit FIRPOL bestimmt. Wenn das Dreieck P_1Q_1R das Polygon INNPOL nicht umschließt, so gehört R nach Satz 3.15 nicht zur AFS. Andernfalls wird der Schnittpunkt der Strecke RQ_1 mit P_1Q_2 als Q und der Schnitt von P_1R mit P_2Q_1 als P bezeichnet. Dann gehören neben dem Punkt R auch die konvexen Polygone, die durch P_1PP_2 beziehungsweise Q_1QQ_2 und dem Rand von FIRPOL gegeben sind, zur AFS. Die Segmente werden \mathcal{P} , \mathcal{Q} und \mathcal{R} genannt. Zu allen Punkten in diesen

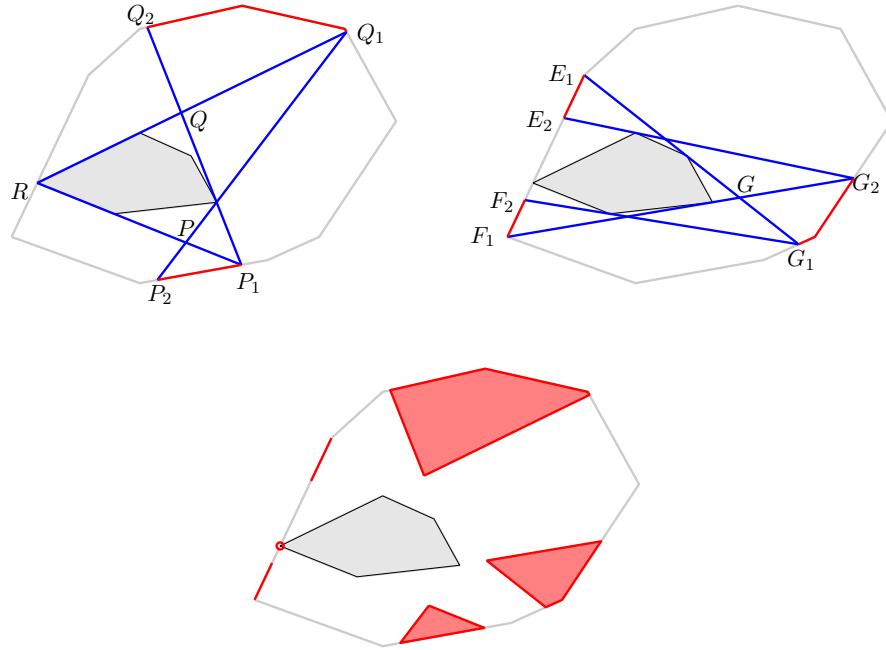


Abbildung 7.2: Konstruktion der AFS, wenn ein Punkt von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL liegt. Die AFS kann in diesem Fall maximal aus sechs Komponenten bestehen, dies ist im unteren Bild dargestellt.

Segmenten lassen sich nach Konstruktion Dreiecke in FIRPOL bestimmen, die INNPOL umschließen.

Wenn R eine Ecke von INNPOL und gleichzeitig eine Ecke von FIRPOL ist, so sind alle Segmente der AFS durch obige Konstruktion bestimmt. Andernfalls liegt R auf einer Kante von FIRPOL. Die Ecken dieser Kante seien E_1 und F_1 . Ausgehend von E_1 und F_1 werden die Tangenten an INNPOL konstruiert. Dies ist in Abbildung 7.2 dargestellt. Falls sich diese Tangenten nicht schneiden, gehören keine weiteren Bereiche zur AFS. Andernfalls wird der Schnittpunkt der Tangenten mit G und die Schnittpunkte der Tangenten mit FIRPOL mit G_1 und G_2 bezeichnet. Von G_1 und G_2 werden die weiteren Tangenten an INNPOL konstruiert. Die Schnittpunkte der Tangenten mit der Strecke E_1F_1 werden mit E_2 und F_2 bezeichnet, entsprechend der Darstellung in Abbildung 7.2. Dann gehören die Strecken E_1E_2 und F_1F_2 zur AFS. Weiterhin gehört das konvexe Polygon zwischen G_1GG_2 und dem Rand von FIRPOL zur AFS. Die jeweiligen Segmente werden \mathcal{E} , \mathcal{F} und \mathcal{G} genannt.

Es ist möglich, dass sowohl die Segmente \mathcal{P} , \mathcal{Q} und \mathcal{R} als auch \mathcal{E} , \mathcal{F} und \mathcal{G} zur AFS gehören. Dann besteht die AFS entweder aus einer, drei oder sechs Zusammenhangskomponenten. Angenommen ein Punkt gehört zu einem der Segmente \mathcal{P} , \mathcal{Q} oder \mathcal{R} und einem der Segmente \mathcal{E} , \mathcal{F} oder \mathcal{G} . Dann existiert ein Dreieck in FIRPOL, das INNPOL umschließt und diesen Punkt als einen Eckpunkt hat. Für die weiteren Eckpunkte muss nach Konstruktion gelten, dass sie auch in einem der Bereiche \mathcal{P} , \mathcal{Q} oder \mathcal{R} und einem der Bereiche \mathcal{E} , \mathcal{F} oder \mathcal{G} liegen. Zudem liegt in jedem der Segmente \mathcal{P} , \mathcal{Q} , \mathcal{R} , \mathcal{E} , \mathcal{F} und \mathcal{G} genau ein Eckpunkt des Dreiecks. Damit folgt, dass je zwei der sechs Segmente zusammenhängen müssen. Es ist analog auch möglich, dass alle sechs Segmente miteinander verbunden sind und die AFS aus genau einer Zusammenhangskomponenten besteht. \square

Satz 7.3. Die AFS einer nichtnegativen Rang-3 Matrix $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ ist leer oder besteht aus einer oder $3m$, $m \in \mathbb{N}$ Zusammenhangskomponenten.

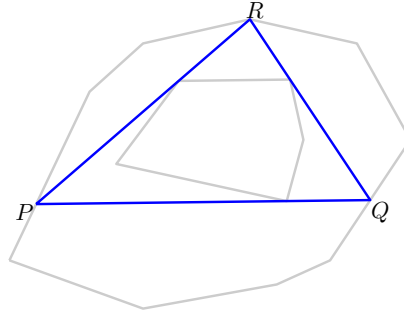


Abbildung 7.3: Ein Beispiel für ein Dreieck, dessen Eckpunkte zum inneren und äußeren Rand der AFS gehören.

Beweis. Der Fall, dass ein Eckpunkt von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL liegt, wurde in den Lemmata 7.1 und 7.2 betrachtet. Daher kann nun angenommen werden, dass kein Punkt von INNPOL auf dem Rand von FIRPOL liegt. Der Rand der AFS wird mit dem Tangentialalgorithmus bestimmt. Die Schnittpunkte einer Tangente an INNPOL mit dem äußeren Polygon FIRPOL sind P und Q . Ausgehend von P und Q werden die weiteren Tangenten an INNPOL bestimmt, die sich im Punkt R schneiden. Liegt R im Inneren oder auf dem Rand von FIRPOL, dann gehört R zum inneren Rand der AFS. Liegt R auf dem Rand von FIRPOL, dann gehören auch P und Q zum inneren Rand der AFS. Denn ausgehend von der Tangente PR an INNPOL kann mittels des Tangentialalgorithmus der Punkt Q konstruiert werden, der dann nach Konstruktion zum inneren Rand der AFS gehört. Analog erhält man P ausgehend von der Tangente QR . Demnach liegen P , Q und R auf dem inneren und äußeren Rand der AFS. Die Anzahl der Punkte der AFS mit dieser Eigenschaft muss somit ein Vielfaches von 3 sein. Ein Beispiel ist in Abbildung 7.3 gegeben.

Nun sei P ein Punkt auf dem Rand von FIRPOL. Ausgehend von P werden die Schnittpunkte Q und R der beiden Tangenten an INNPOL mit FIRPOL bestimmt. Da P zur AFS gehört, schließt das Dreieck PQR INNPOL ein. Wird nun P in positiver (beziehungsweise negativer) Richtung auf dem Rand von FIRPOL verschoben, so verschieben sich die Punkte Q und R , die sich wiederum als Schnittpunkt der Tangenten an INNPOL mit FIRPOL ergeben, ebenfalls durch die Konstruktion in positiver (beziehungsweise negativer) Richtung. Gehört P zur AFS, so gehören auch Q und R zur AFS. Gehört P nicht zur AFS, so gehören auch Q und R nicht zur AFS. Dies zeigt, ist P ein Punkt des inneren und äußeren Randes der AFS, in dessen Umgebung Randpunkte von FIRPOL existieren, die nicht zur AFS gehören, dann haben Q und R dieselbe Eigenschaft. Ist P ein Punktsegment der AFS, so sind auch Q und R Punktsegmente.

Es können dann die folgenden Fälle auftreten: die Menge zulässiger nichtnegativer Faktorisierungen der Ausgangsmatrix ist leer und es existiert keine AFS; die AFS besteht aus genau einem Segment; oder die AFS besteht aus mehreren Segmenten. Falls die AFS aus mehreren Segmenten besteht, so hat jedes Segment genau einen Punkt für den ein Verschieben in positive oder negative Richtung nicht möglich ist. Weiterhin sind einem solchen Punkt nach dem Tangentialalgorithmus zwei weitere Punkte in einem anderen Segment mit der gleichen Eigenschaft zugeordnet. Damit muss die Anzahl der Zusammenhangskomponenten ein Vielfaches von 3 sein. \square

Im folgenden Abschnitt soll gezeigt werden, dass es für jedes beliebige Vielfache von 3

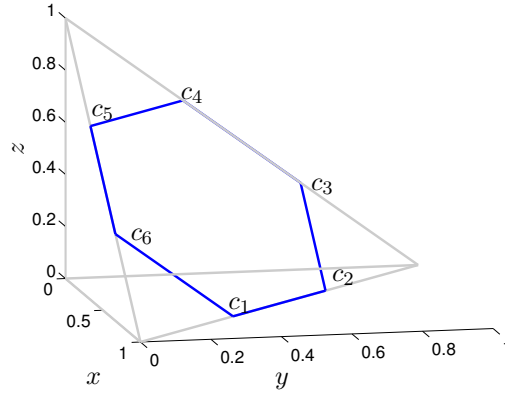


Abbildung 7.4: Veranschaulichung zum Beweis von Satz 7.4. Dargestellt sind die Zeilen c_i^T einer Matrix C , für die die AFS von $D = CC^T$ aus genau sechs Punktsegmenten besteht.

eine Matrix D gibt, deren AFS genauso viele Zusammenhangskomponenten besitzt.

7.1.2 Konstruktion einer AFS mit $3m$ Zusammenhangskomponenten

In diesem Abschnitt wird ein konstruktiver Beweis erbracht, dass Mengen zulässiger Lösungen mit $3m$, $m \in \mathbb{N}$ Zusammenhangskomponenten existieren. Die AFS zu der Matrix D , die in dem Beweis verwendet wird, besteht aus genau $3m$ Punktsegmenten. Ein alternativer Zugang, wie Matrizen D konstruiert werden können, deren zugehörige Menge der zulässigen Lösungen aus $3m$ Zusammenhangskomponenten besteht, wird in Kapitel 7.2 vorgestellt.

Satz 7.4. *Für jede positive natürliche Zahl $m \in \mathbb{N}$ existiert eine nichtnegative Rang-3-Matrix $D \in \mathbb{R}^{3m \times 3m}$ deren AFS aus genau $3m$ Zusammenhangskomponenten besteht.*

Beweis. Zu einer vorgegebenen Anzahl $3m$ soll eine Matrix D konstruiert werden, deren AFS aus genau $3m$ Zusammenhangskomponenten besteht. Dazu wird in das Dreieck mit den Eckpunkten $(1, 0, 0)^T$, $(0, 1, 0)^T$ und $(0, 0, 1)^T$ im \mathbb{R}^3 ein regelmäßiges Polygon mit $3m$ Ecken so gelegt, dass auf jeder Kante des Dreiecks eine Kante des Polygons liegt. Die Eckpunkte des Polygons sind dann Punkte in der Ebene $x + y + z = 1$. Die Punkte seien im mathematisch positiven Sinn geordnet und die Koordinaten der Punkte werden zeilenweise in einer Matrix $C \in \mathbb{R}^{3m \times 3}$ zusammengefasst. Die Zeilen von C werden mit c_i^T , $1 \leq i \leq 3m$ bezeichnet. Ein Beispiel für den Fall $m = 2$ ist in Abbildung 7.4 dargestellt. Dort sind die Zeilen von C durch die Ecken eines regelmäßigen Sechsecks gegeben.

Die Matrix $D \in \mathbb{R}^{3m \times 3m}$ wird nun als $D = CC^T$ definiert. Für die Einträge $D(i, j)$, $1 \leq i, j \leq 3m$ gilt

$$D(i, j) = D(\text{mod}(i, 3m) + 1, \text{mod}(j, 3m) + 1), \quad \text{da} \quad (7.1)$$

$$D(i, j) = c_i^T c_j = c_{\text{mod}(i, 3m)+1}^T c_{\text{mod}(j, 3m)+1} \quad (7.2)$$

erfüllt ist. Die Gleichung (7.2) gilt, da sich das Skalarprodukt zweier Vektoren aus dem Produkt der Beträge der Vektoren und dem Sinus des eingeschlossenen Winkels ergibt. Die Vektoren c_i haben aufgrund der Lage im regelmäßigen $3m$ -Eck denselben Betrag und aufgrund der Anordnung der Zeilen von C , stimmen die Winkel zwischen den Vektoren c_i und c_j sowie zwischen $c_{\text{mod}(i, 3m)+1}$ und $c_{\text{mod}(j, 3m)+1}$ überein.

Mit der Permutationsmatrix $S \in \mathbb{R}^{(3m) \times (3m)}$

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & & \ddots & 1 \\ 1 & 0 & & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

gilt nun $D = S^T D S$, wie aus der folgenden Umformung folgt:

$$\begin{aligned} S^T D S &= \begin{pmatrix} D(3m, 1) & D(3m, 2) & \dots & D(3m, 3m) \\ D(1, 1) & D(1, 2) & \dots & D(1, 3m) \\ D(2, 1) & D(2, 2) & \dots & D(2, 3m) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ D(3m-1, 1) & D(3m-1, 2) & \dots & D(3m-1, 3m) \end{pmatrix} S \\ &= \begin{pmatrix} D(3m, 3m) & D(3m, 1) & \dots & D(3m, 3m-1) \\ D(1, 3m) & D(1, 1) & \dots & D(1, 3m-1) \\ D(2, 3m) & D(2, 1) & \dots & D(2, 3m-1) \\ D(3m-1, 3m) & D(3m-1, 1) & \dots & D(3m-1, 3m-1) \end{pmatrix} = D. \end{aligned}$$

Die letzte Gleichheit ergibt sich aus Gleichung (7.1). Neben der Faktorisierung $D = C C^T$ ist eine weitere Faktorisierung daher durch $D = (S^T C)(C^T S)$ gegeben. Dieses Argument kann wiederholt angewendet werden. Nach m -facher Anwendung von S und S^T auf $C C^T$ tritt eine Permutation der Spalten von C auf. Dies entspricht einer Rotation des regelmäßigen Polygons mit $3m$ Ecken, bei der die Kanten, die zuvor auf einer der Seiten des Dreiecks mit den Ecken $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ und $(0, 0, 1)$ lagen, wieder auf Dreiecksseiten abgebildet werden. Es ergeben sich daher durch die wiederholte Multiplikation von $C C^T$ mit S und S^T insgesamt m Faktorisierungen von D , die nicht durch Permutation oder Skalierung der Spalten von C ineinander überführt werden können.

Es soll nun gezeigt werden, dass diese Faktorisierungen jeweils zu drei Punktsegmenten der AFS gehören und genau $3m$ Zusammenhangskomponenten der AFS existieren. Da $D = C C^T$ gilt, stimmt der Zeilenraum von D mit dem Spaltenraum von C überein. Zeilen einer Matrix \tilde{A} , für die $D = \tilde{C} \tilde{A}$ eine nichtnegative Faktorisierung von D ist, liegen im Schnitt des Spaltenraumes von C mit dem positiven Orthanten. Weiterhin können die Zeilen von \tilde{A} als skaliert angenommen werden, etwa bezüglich der Einsnorm. Der Schnitt des skalierten Spaltenraums von C mit dem positiven Orthanten des \mathbb{R}^{3m} liefert ein Polygon mit maximal $3m$ Ecken. Punkten auf den Kanten dieses Polygons sind Vektoren zugeordnet, die mindestens eine Nullkomponente aufweisen. Die Ecken des Polygons gehören somit zu Vektoren mit mindestens zwei Nullkomponenten.

Die Zeilen der Matrix C haben jeweils zwei Nullkomponenten, da nach Konstruktion je zwei Punkte des regelmäßigen Polygons auf jeder Kante des Dreiecks mit den Ecken $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ und $(0, 0, 1)$ liegen. Diese Eigenschaft bleibt auch bei wiederholter Multiplikation mit S^T von links erhalten. Zudem lassen sich nichtnegative Linearkombinationen der so erhaltenen Vektoren bilden, die genau eine Nullkomponente besitzen. Diese Linearkombinationen liegen auch im Schnitt des positiven Orthanten mit dem Spaltenraum von C , woraus folgt, dass die Vektoren mit zwei Nulleinträgen Ecken des Schnittpolygons sind. Damit sind die Punkte, die zu den Spalten von C gehören, gerade Eckpunkte des Schnittpolygons und die weiteren Ecken ergeben sich durch wiederholte Multiplikation mit S^T von links.

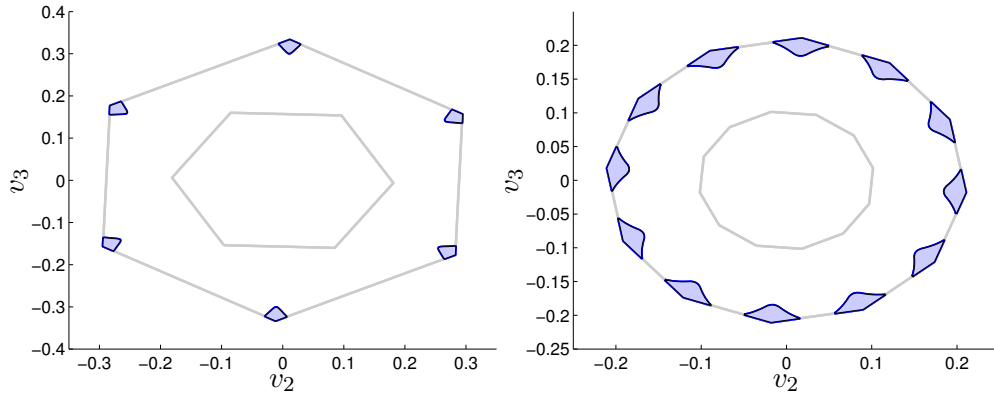


Abbildung 7.5: Beispiele für Mengen zulässiger Lösungen mit sechs und zwölf Zusammenhangskomponenten. Die zugehörigen Matrizen $D = CC^T$ wurden entsprechend des Beweises von Satz 7.4 konstruiert. Zu der Matrix C wurde dabei jeweils ein Hundertstel der Einsmatrix addiert, um eine AFS mit Flächensegmenten zu erhalten.

Weiterhin gibt es nach Konstruktion von D zu jedem Paar von Ecken, das gemeinsam in einer Faktorisierung von D auftritt, genau zwei Punkte, die auf der Verbindungsgeraden zwischen diesen Polygonecken liegen. Dies folgt aus der Faktorisierung $D = CC^T$ und der Eigenschaft, dass es in jeder Spalte von C genau zwei Nullkomponenten gibt. Aufgrund dieser geometrischen Situation können nur die Ecken des begrenzenden Polygons als Zeilen im Faktor \tilde{A} auftreten und alle möglichen Faktorisierungen sind bereits oben angegeben. \square

Die in dem Beweis beschriebene Konstruktion liefert eine AFS, die aus Punktsegmenten besteht. Durch Addition einer positiven Störungsmatrix auf den Faktor C ist es möglich Flächensegmente zu erhalten. Zwei Beispiele für Mengen zulässiger Lösungen mit sechs und zwölf Zusammenhangskomponenten sind in Abbildung 7.5 dargestellt.

Analoge Konstruktionen sind aus der Literatur nicht bekannt. Die Arbeit ‚Theorems on Positive Data: On the Uniqueness of NMF‘ von Laurberg et al. [40] zeigt jedoch ein Beispiel für eine Menge zulässiger Lösungen, die aus sechs Zusammenhangskomponenten besteht. Dabei sind das innere und äußere Polygon jeweils durch Sechsecke gegeben. Dies ist analog zu der Konstruktion im Beweis von Satz 7.4. Die Arbeit von Laurberg et al. beschäftigt sich mit der Eindeutigkeit der nichtnegativen Matrixfaktorisierung und gibt dieses Beispiel für einen Fall der Uneindeutigkeit an. Die Idee zur Konstruktion der Matrix D in Satz 7.4 basiert auf der oben genannten Arbeit.

7.2 Topologische Struktur der Menge zulässiger Lösungen von Rang-4-Matrizen

Die topologische Struktur der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen vom Rang 4 unterscheidet sich deutlich von der Struktur im Fall von Rang-3-Matrizen. Es wird vermutet, dass zu jeder beliebigen natürlichen Zahl m eine Matrix D vom Rang 4 existiert, sodass die zugehörige Menge der zulässigen Lösungen aus genau m Zusammenhangskomponenten besteht.

Es werden in diesem Abschnitt jeweils Polyeder INNPOL und FIRPOL betrachtet, so dass die zugehörige AFS, gemäß Satz 3.15, die gewünschten Eigenschaften zeigt. Dabei

wird die Matrix D nicht angegeben. Der folgende Satz rechtfertigt dieses Vorgehen.

Satz 7.5. *Für jedes Paar von zwei ineinander gebetteten Polytopen im \mathbb{R}^{s-1} , für die der Nullpunkt jeweils in ihrem Inneren liegt, kann eine nichtnegative Matrix D vom Rang s angegeben werden, sodass die zu D gehörenden Polytope INNPOL und FIRPOL in der RS-Skalierung aus einer linearen Transformationen und Skalierung der gegebenen Polytope hervorgehen. Weiter gehen Simplexe, die zwischen den gegebenen Polytopen eingebettet sind, durch diese Transformation und Skalierung in Simplexe über, die im Abschluss von FIRPOL liegen und INNPOL enthalten.*

Beweis. Das innere Polytop werde mit \mathcal{P}_1 und das äußere Polytop mit \mathcal{P}_2 bezeichnet. Den Facetten des äußeren Polytops \mathcal{P}_2 können Normalengleichungen im \mathbb{R}^{s-1} zugeordnet werden. Ein Punkt $\tilde{t} \in \mathbb{R}^{s-1}$ gehöre zur Facette \mathcal{F}_i von \mathcal{P}_2 , wenn er auf dem Rand des Polytops liegt und zudem die Gleichung

$$\tilde{t}_1 \tilde{v}_{i,2} + \tilde{t}_2 \tilde{v}_{i,3} + \dots + \tilde{t}_{s-1} \tilde{v}_{i,s} = -\tilde{v}_{i,1}$$

erfüllt. Die Koeffizienten $\tilde{v}_{i,j}$, $j = 1, \dots, (s-1)$ der Normalengleichungen können dabei so gewählt werden, dass für alle Facetten \mathcal{F}_i der Koeffizient $\tilde{v}_{i,1} = 1$ ist. Dies ist möglich, da der Nullpunkt im Inneren von \mathcal{P}_2 liegt. Das äußere Polytop \mathcal{P}_2 besitze n Facetten. Eine Matrix $\tilde{V} \in \mathbb{R}^{n \times s}$ kann dann als $\tilde{V}(i, j) = \tilde{v}_{i,j}$ definiert werden.

Es soll nun gezeigt werden, dass \tilde{V} den vollen Rang besitzt. In einem Eckpunkt P des äußeren Polytops schneiden sich mindestens $s-1$ Facetten $\tilde{F}_{i_1}, \dots, \tilde{F}_{i_{s-1}}$. Die Normalenvektoren $(\tilde{v}_{i_1,2}, \tilde{v}_{i_1,3}, \dots, \tilde{v}_{i_1,s})^T$, $i \in \{i_1, \dots, i_{s-1}\}$ dieser Facetten spannen einen Kegel \mathcal{K} im \mathbb{R}^{s-1} auf. Da das äußere Polytop eine abgeschlossene Menge ist, die den Nullpunkt enthält, existiert eine Facette \tilde{F}_j , deren negativer Normalenvektor im Kegel \mathcal{K} liegt. Da aber $\tilde{v}_{i,1} = 0$, $i \in \{i_1, \dots, i_{s-1}, j\}$ gilt, sind die Zeilen i_1, \dots, i_{s-1} und j von \tilde{V} linear unabhängig. Dies zeigt, dass \tilde{V} vollen Rang besitzt.

Das innere Polytop \mathcal{P}_1 habe k Eckpunkte, die durch $(p_{i,1}, \dots, p_{i,s-1})^T$, $1 \leq i \leq k$ gegeben sind. Mithilfe dieser Eckpunkte wird nun die Matrix D definiert. Die Zeilen von D ergeben sich als

$$D(i, :) = \left(\tilde{V}(:, 1) + \sum_{j=1}^{s-1} p_{i,j} \tilde{V}(:, j+1) \right)^T,$$

dabei gilt $1 \leq i \leq k$. Nach Konstruktion der Matrix \tilde{V} gilt für Punkte $(q_1, \dots, q_{s-1})^T$, die innerhalb des äußeren Polytops \mathcal{P}_2 liegen, dass

$$\left(\tilde{V}(:, 1) + \sum_{j=1}^{s-1} q_j \tilde{V}(:, j+1) \right)^T \geq 0$$

erfüllt ist. Damit ist D eine nichtnegative Matrix im $\mathbb{R}^{k \times n}$. Die abgeschnittene Singulärwertzerlegung von D vom Rang s sei durch $U \Sigma V^T$ gegeben. Da V^T und \tilde{V}^T denselben Rang haben und ihr Zeilenraum jeweils mit dem von D übereinstimmt, existiert eine reguläre Matrix $S \in \mathbb{R}^{s \times s}$, für die $\tilde{V}^T = S V^T$ gilt.

Nun sei $t \in \mathbb{R}^{s-1}$ ein Punkt innerhalb des Polytops \mathcal{P}_2 . Dann existiert ein Vektor $r \in \mathbb{R}^s$, für den

$$r^T = (1, t)^T \text{ und} \\ r^T \tilde{V}^T \geq 0$$

gilt. Damit gilt auch $r^T S V^T \geq 0$. Nun wird auf den Vektor $r^T S$ die RS-Skalierung angewendet. Dies führt auf den Vektor

$$\tilde{r} = \frac{r^T S}{r^T S V^T e}.$$

Der Nenner ist dabei ungleich Null, denn da S und V Matrizen vollen Ranges sind, folgt aus $r \neq 0$, dass auch $r^T S V^T \neq 0$ erfüllt ist. Weiter ist $r^T S V \geq 0$, sodass sich $r^T S V^T e \neq 0$ ergibt. Der Punkt $\tilde{t} = (\tilde{r}_2, \dots, \tilde{r}_s)^T \in \mathbb{R}^{s-1}$ liegt dann innerhalb des Polytops FIRPOL zur Matrix D in der FSV-Skalierung.

Da die Eckpunkte von INNPOL und die Eckpunkte des inneren Polytops \mathcal{P}_1 niedrigdimensionale Darstellungen der Zeilen von D in der Basis des zweiten bis s -ten Zeilenvektors von V^T beziehungsweise \tilde{V}^T sind, gehen diese Punkte durch Transformationen und Skalierung ineinander über. Innerhalb von FIRPOL und des äußeren Polytops \mathcal{P}_2 liegen die Punkte, denen nichtnegative Vektoren im Zeilenraum von D zugewiesen sind. Nach Konstruktion gehen daher auch die Eckpunkte von FIRPOL in die Eckpunkte des äußeren Polytops \mathcal{P}_2 über.

Nun sei ein Simplex $t_1 t_2 \dots t_s$ gegeben, dass zwischen den Polytopen \mathcal{P}_1 und \mathcal{P}_2 eingebettet ist. Jeder Eckpunkt p_i des Polytops \mathcal{P}_1 kann als Konvexkombination der Punkte t_1, t_2, \dots, t_s in der Form

$$p_i = \alpha_{i,1} t_1 + \alpha_{i,2} t_2 + \dots + \alpha_{i,s} t_s$$

dargestellt werden. Dabei gilt für die Koeffizienten $\alpha_{i,1} + \alpha_{i,2} + \dots + \alpha_{i,s} = 1$ und $\alpha_1, \dots, \alpha_s \geq 0$. Folglich gilt auch

$$\frac{p_i^T S}{p_i^T S V^T e} = \frac{\alpha_{i,1} t_1^T S V^T e}{p_i^T S V^T e} \frac{t_1^T S}{t_1^T S V^T e} + \dots + \frac{\alpha_{i,s} t_s^T S V^T e}{p_i^T S V^T e} \frac{t_s^T S}{t_s^T S V^T e}. \quad (7.3)$$

Damit sind die transformierten und skalierten Eckpunkte von \mathcal{P}_1 gerade Linearkombinationen der transformierten und skalierten Eckpunkte des eingebetteten Simplex. Die Eckpunkte von \mathcal{P}_1 gehen durch die Transformation und Skalierung in die Eckpunkte von INNPOL über und die transformierten und skalierten Eckpunkte des Simplex liegen im Abschluss von FIRPOL. Für die Linearkoeffizienten in Gleichung (7.3) gilt

$$\frac{\alpha_{i,1} t_1^T S V^T e}{p_i^T S V^T e} + \dots + \frac{\alpha_{i,s} t_s^T S V^T e}{p_i^T S V^T e} = \frac{\alpha_{i,1} t_1^T S V^T e + \dots + \alpha_{i,s} t_s^T S V^T e}{p_i^T S V^T e} \quad (7.4)$$

$$= \frac{p_i^T S V^T e}{p_i^T S V^T e} = 1. \quad (7.5)$$

Weiter sind die Linearkoeffizienten größer oder gleich Null, da die Punkte t_1, t_2, \dots, t_s und p_i innerhalb des Polygons \mathcal{P}_2 liegen. Damit folgt, dass die Eckpunkte von INNPOL Konvexkombinationen der transformierten und skalierten Punkte t_1, t_2, \dots, t_s sind. Dies zeigt die Behauptung. \square

Aus diesem Satz und Satz 3.15 folgt, dass es für die Analyse der topologischen Struktur der Menge der zulässigen Lösungen genügt, für Polytope INNPOL und FIRPOL die Menge der eingeschlossenen Simplexe zu betrachten. Dieser Satz kann auch angewendet werden, um Matrizen D vom Rang 3 zu konstruieren, für die die Anzahl der Zusammenhangskomponenten der AFS ein positives Vielfaches von 3 ist. In dem Beweis von Satz 7.4 ist eine solche Matrix aber auch explizit angegeben.

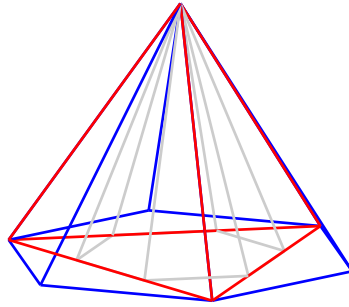


Abbildung 7.6: Darstellung von INNPOL und FIRPOL zu einer Rang-4-Matrix D , deren AFS aus 7 Zusammenhangskomponenten besteht. Das äußere und innere Polyeder sind gerade Pyramiden, deren Grundflächen durch regelmäßige Sechsecke gegeben sind. Das äußere Polyeder ist blau und das innere Polyeder grau dargestellt. Ein eingebetteter Tetraeder ist rot gekennzeichnet. Die Menge der zulässigen Lösungen ist durch die Eckpunkte von FIRPOL gegeben.

Um die Anzahl der Zusammenhangskomponenten der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen D vom Rang 4 zu untersuchen, werden nun Polyeder INNPOL und FIRPOL angegeben und die Menge der eingeschlossenen Tetraeder untersucht.

Um zu zeigen, dass die AFS zu einer Matrix vom Rang 4 aus genau einer Zusammenhangskomponente bestehen kann, wird angenommen, dass das innere Polyeder in einer Kugel enthalten ist. Diese Kugel liege in einem regelmäßigen Tetraeder. Eine weitere Kugel \mathcal{S} umschließe diesen Tetraeder und liege in FIRPOL. Dann kann jeder Punkt auf dem Rand der Kugel \mathcal{S} als Eckpunkt eines regelmäßigen Tetraeders gewählt werden, das INNPOL umschließt. Nach Satz 3.15 und Korollar 3.17 folgt, dass die Menge der zulässigen Lösungen dann aus genau einer Zusammenhangskomponente besteht.

Nun soll ein Beispiel für eine Menge zulässiger Lösungen angegeben werden, die aus genau zwei Zusammenhangskomponenten besteht. Als äußeres Polyeder wird eine gerade Pyramide gewählt, deren Grundfläche beispielsweise ein regelmäßiges Dreieck ist. In dem Inkreis \mathcal{S}_1 dieses Dreiecks ist ein weiteres regelmäßiges Dreieck gegeben. Der Inkreis dieses Dreiecks sei \mathcal{S}_2 . Das innere Polyeder sei nun eine gerade Pyramide, deren Spitze mit der der äußeren Pyramide übereinstimmt. Ihre Grundfläche liege innerhalb des Kreises \mathcal{S}_2 . Ein Punkt der AFS ist dann durch die Spitze der Pyramiden gegeben. Außerdem gehört jeder Punkt auf dem Kreis \mathcal{S}_1 zur Menge der zulässigen Lösungen. Nach Satz 3.15 und Korollar 3.17 folgt, dass die Menge der zulässigen Lösungen aus genau 2 Zusammenhangskomponenten besteht.

Sind INNPOL und FIRPOL durch identische Tetraeder gegeben, so ist der einzige Tetraeder in FIRPOL, der INNPOL umschließt, durch FIRPOL selbst gegeben. Die Menge der zulässigen Lösungen besteht entsprechend des Satz 3.15 daher aus genau 4 Punkten, den Eckpunkten von FIRPOL. Es können allgemein Polyeder INNPOL und FIRPOL angegeben werden, für die die zugehörige Menge der zulässigen Lösungen aus genau $3m + 1$ Zusammenhangskomponenten besteht, wobei $m \in \mathbb{N}, m \geq 1$ gilt, wie im Folgenden bewiesen wird.

Lemma 7.6. *Für jede natürliche Zahl $m \geq 1$ existiert eine nichtnegative Matrix D vom Rang 4, deren zugehörige Menge der zulässigen Lösungen in der Skalierung $w^T x = 1$ aus genau $3m + 1$ Zusammenhangskomponenten besteht.*

Beweis. Nach Satz 7.5 genügt es Polyeder INNPOL und FIRPOL anzugeben, sodass die AFS entsprechend Satz 3.15 aus genau $3m + 1$ Zusammenhangskomponenten besteht. Das äußere Polyeder sei eine gerade Pyramide, deren Grundfläche durch ein regelmäßiges $3m$ -Eck gegeben ist. Das innere Polyeder sei ebenfalls eine gerade Pyramide. Ihre Spitze falle mit der der äußeren Pyramide zusammen. Ihre Grundfläche sei ebenfalls ein regelmäßiges $3m$ -Eck, das in derselben Ebene liegt wie die Grundfläche der äußeren Pyramide. Weiter sollen die Verlängerungen der Kanten der Grundfläche der inneren Pyramide die Grundfläche der äußeren Pyramide in deren Eckpunkten schneiden, vergleiche Abbildung 7.6 für den Fall $m = 2$.

Tetraeder in FIRPOL, die INNPOL umschließen, müssen die Spitze der Pyramiden als einen Eckpunkt enthalten. Die weiteren Eckpunkte des Tetraeders müssen in der Grundfläche der äußeren Pyramide liegen. Damit die Punkte in der Grundfläche der äußeren Pyramide ein Dreieck aufspannen, die die Grundfläche der inneren Pyramide enthält, müssen es entsprechend der Konstruktion von INNPOL Eckpunkte von FIRPOL sein. Für alle Eckpunkte der Grundfläche von FIRPOL kann auf diese Weise ein Tetraeder konstruiert werden, das INNPOL umschließt. Damit besteht die AFS aus genau $3m + 1$ Punkten, den Eckpunkten von FIRPOL. Ein Beispiel ist in Abbildung 7.6 dargestellt. \square

Es wird davon ausgegangen, dass auch für weitere Anzahlen m Rang-4-Matrizen D existieren, deren zugehörige Menge der zulässigen Lösungen aus genau m Zusammenhangskomponenten bestehen.

Vermutung 7.7. *Zu jeder natürlichen Zahlen m existiert eine nichtnegative Rang-4-Matrix D , deren zugehörige Menge der zulässigen Lösungen in einer beliebigen Skalierung $w^T x = 1$ aus genau m Zusammenhangskomponenten besteht.*

Beweisidee: Es müsste gezeigt werden, dass es Mengen zulässiger Lösungen zu Rang-4-Matrizen gibt, die aus genau $3m$ und $3m + 2$ Zusammenhangskomponenten bestehen. Dabei ist $m \in \mathbb{N}$, $m \geq 1$. Für alle weiteren Fälle wurden oben bereits Beispiele beschrieben.

Es wird weiter vermutet, dass die folgende Konstruktion von Polygonen INNPOL und FIRPOL auf eine Menge zulässiger Lösungen führt, die aus genau $3m + 2$, $m \geq 2$ Zusammenhangskomponenten besteht:

Das äußere Polyeder FIRPOL ergibt sich aus der konvexen Hülle von zwei geraden Pyramiden. Die Grundfläche der ersten Pyramide sei ein regelmäßiges $3(m - 1)$ -Eck mit Umkreisradius 1, das in der Ebene $\mathcal{E}_1 : z = -1$ liegt. Die Spitze der Pyramide sei durch den Punkt $P_1 = (0, 0, -2)^T$ gegeben. Die Grundfläche der zweiten Pyramide sei ein regelmäßiges Dreieck mit Umkreisradius 1, das in der Ebene $\mathcal{E}_2 : z = 1$ liegt. Die Spitze der Pyramide sei durch den Punkt $P_2 = (0, 0, 2)^T$ gegeben. Weiter existieren drei Eckpunkte der ersten Pyramide in der Ebene \mathcal{E}_1 , deren Verbindungsstrecke mit je einem der Eckpunkte der Grundfläche der zweiten Pyramide senkrecht zu den Ebenen \mathcal{E}_1 und \mathcal{E}_2 steht. Ein Beispiel für den Fall $m = 3$ ist in Abbildung 7.7 dargestellt.

Das innere Polyeder INNPOL liegt zwischen den Ebenen \mathcal{E}_1 und \mathcal{E}_2 . In der Ebene \mathcal{E}_1 liegen drei Punkte von INNPOL, die ein regelmäßiges Dreieck aufspannen. Die Punkte liegen auf den Verbindungsstrecken von P_1 mit den Eckpunkten von FIRPOL in der Ebene \mathcal{E}_2 . In der Ebene \mathcal{E}_2 liegen $3(m - 1)$ Eckpunkte von INNPOL, die ein regelmäßiges Polygon aufspannen. Jede Kante dieses Polygons liegt auf einer Seite eines Tetraeders, das durch P_2 und drei Punkte in der Ebene \mathcal{E}_1 , die ein regelmäßiges Dreieck aufspannen, gegeben

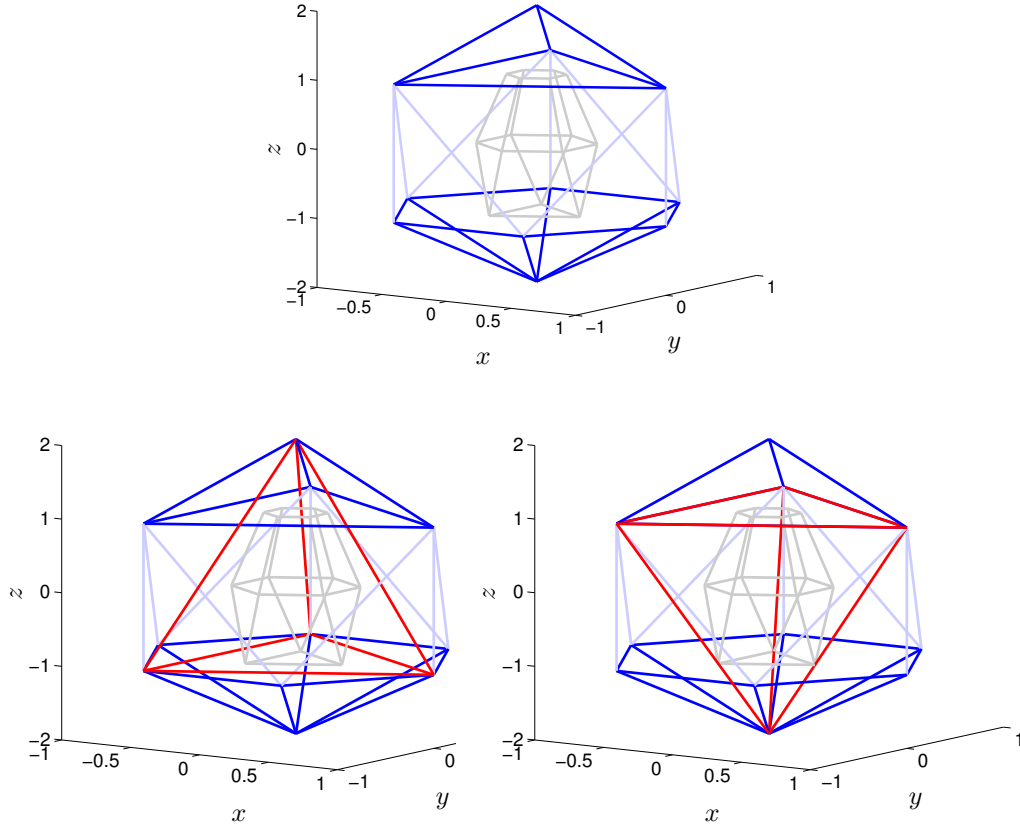


Abbildung 7.7: Darstellung von Polyedern INNPOL und FIRPOL, deren zugehörige Menge der zulässigen Lösungen vermutlich aus 11 Zusammenhangskomponenten besteht. Das innere Polyeder ist grau dargestellt. Das äußere Polyeder ergibt sich aus der konvexen Hülle von zwei Pyramiden, deren Grundflächen zueinander parallel sind. Die Pyramiden sind blau und die Verbindungskanten zwischen den Pyramiden hellblau dargestellt. Die unteren Abbildungen zeigen zwei Beispiele für Tetraeder, die in FIRPOL liegen und INNPOL einschließen.

ist. Der Schnitt von INNPOL mit der Ebene $\mathcal{E}_0 : z = 0$ ist ein regelmäßiges $3(m-1)$ -Eck. Jede Kante dieses Polygons liegt ebenfalls auf einer Seite eines Tetraeders, das durch P_2 und drei Punkte in der Ebene \mathcal{E}_1 , die ein regelmäßiges Dreieck aufspannen, gegeben ist. INNPOL ergibt sich nun aus der konvexen Hülle dieser Punkte in den Ebenen $\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1$ und \mathcal{E}_2 .

Nach Konstruktion von INNPOL gehören die Eckpunkte von FIRPOL zur AFS, denn jeder dieser Punkte kann als Eckpunkt eines Tetraeders gewählt werden, das in FIRPOL liegt und INNPOL umschließt. Es wird vermutet, dass die Menge der zulässigen Lösungen genau durch diese $3m+2$ Punkte gegeben ist. Es wäre noch zu zeigen, dass es neben den beschriebenen Tetraedern keine weiteren Tetraeder gibt, die zwischen INNPOL und FIRPOL eingebettet sind.

Werden die Polytope INNPOL und FIRPOL, die auf Mengen zulässiger Lösungen mit genau $3m+1$ beziehungsweise $3m+2$ Zusammenhangskomponenten führen, so verändert, dass die Menge der zulässigen Lösungen größer wird, können möglicherweise einzelne Seg-

mente der AFS zusammenwachsen, sodass insgesamt $3m$ Zusammenhangskomponenten entstehen könnten. Damit die AFS größer wird, kann INNPOL verkleinert oder FIRPOL vergrößert werden.

Die Ergebnisse dieses Abschnitts erlauben es weiter für Matrizen vom Rang $s \geq 4$ Aussagen über die Anzahl der Zusammenhangskomponenten der AFS zu treffen.

Lemma 7.8. *Wenn eine nichtnegative Rang-4-Matrix \tilde{D} existiert, deren zugehörige Menge der zulässigen Lösung aus genau $m \in \mathbb{N}$ Zusammenhangskomponenten besteht, dann existiert auch eine Rang- s -Matrix D , deren AFS aus genau $m + s - 4$ Zusammenhangskomponenten besteht. Dabei gilt $s \geq 4$.*

Beweis. Die Menge der zulässigen Lösungen der Matrix \tilde{D} bestehe aus genau m Zusammenhangskomponenten. Dann wird die Matrix D betrachtet, die durch

$$D = \begin{pmatrix} \tilde{D} & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

gegeben ist. Dabei bezeichnet I die Einheitsmatrix im $\mathbb{R}^{(s-4) \times (s-4)}$ und 0 die Nullmatrizen entsprechenden Formats. Da die Zeilen von D entsprechend der Faktorisierung $D = CA$ als nichtnegative Linearkombinationen der nichtnegativen Zeilen von A darstellbar sind, sind $s - 4$ Zeilen von A durch die letzten $s - 4$ Zeilen von D bis auf skalare Vielfache eindeutig bestimmt. Diesen Zeilen von A ist jeweils ein Punkt in der Menge der zulässigen Lösungen zugeordnet. Da die AFS von \tilde{D} aus m Zusammenhangskomponenten besteht, ergeben sich für die Menge der zulässigen Lösungen von D weitere m Zusammenhangskomponenten. Es folgt, dass die Menge der zulässigen Lösungen von D aus insgesamt $m + s - 4$ Zusammenhangskomponenten besteht. \square

7.3 Fazit

Die Ergebnisse dieses Kapitels sind vor allem theoretischer Natur. Für Matrizen $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ von Messdaten zu Dreikomponentensystemen wurden in der Literatur bisher keine Mengen zulässiger Lösungen mit mehr als drei Zusammenhangskomponenten beschrieben. Die Ergebnisse sind aber insofern von Bedeutung, als dass sie Grenzen von numerischen Verfahren zur Konstruktion der AFS aufzeigen. Der triangle-boundary-enclosure Algorithmus [26] (vergleiche Abschnitt 5.2.2) konstruiert die Segmente der AFS etwa ausgehend von einer nichtnegativen Faktorisierung von D . Aus dieser Faktorisierung ergeben sich drei Punkte der AFS und es können somit maximal drei Segmente der AFS mittels des Algorithmus bestimmt werden. Der klassische polygon-inflation Algorithmus zeigt das gleiche Verhalten (vergleiche Abschnitt 5.2.3). Der inverse polygon-inflation Algorithmus erlaubt es hingegen eine AFS mit einer beliebigen Anzahl an Zusammenhangskomponenten zu bestimmen [56, 57].

Dieses Kapitel zeigt weiter die Stärke der geometrischen Beschreibung der Menge der zulässigen Lösungen zur Analyse der Eigenschaften dieser Menge. Die Beweise über die möglichen Anzahlen der Zusammenhangskomponenten der AFS für Rang-3- und Rang-4-Matrizen basieren auf rein geometrischen Betrachtungen.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Im Zusammenhang mit der Analyse nichtnegativer Matrixfaktorisierungen treten eine Reihe unterschiedlicher mathematischer Fragestellungen auf. In dieser Promotionsschrift wurden insbesondere (approximativ) nichtnegative Rangfaktorisierungen untersucht, wobei insbesondere auf Matrizen vom Rang 3 und 4 eingegangen wurde. Die vorgeschlagenen Methoden können zur Analyse spektroskopischer Messdaten von Drei- und Vierkomponentensystemen angewendet werden. Die Betrachtung für Zweikomponentensysteme ist in der Literatur dargestellt und kann analog zur Beschreibung in Kapitel 3 durchgeführt werden. Der in Kapitel 6 angewendete Strahlenalgorithmus [58] kann für Systeme mit mehr als 4 Komponenten verallgemeinert werden.

Die Rangfaktorisierung ist nur eine mögliche Schwerpunktsetzung bei der Untersuchung nichtnegativer Matrixfaktorisierung. In der Literatur wurden beispielsweise auch symmetrische [38], dünnbesetzte [30] oder orthogonale [5] nichtnegative Matrixfaktorisierungen betrachtet. Die Wahl der Nebenbedingungen, die dabei an die Matrixfaktoren gestellt werden, sind abhängig vom jeweiligen Anwendungskontext. Die zusätzlichen Forderungen schränken die Menge der zulässigen Faktorisierungen ein und verlangen nach Algorithmen, die die jeweiligen Nebenbedingungen berücksichtigen. Diese Arbeit beleuchtet somit nur einen Ausschnitt der Theorie nichtnegativer Matrixfaktorisierungen. Die zentralen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit sind im Folgenden kurz zusammengefasst. Anschließend wird ein Ausblick zu weiteren Forschungsfragen und Anwendungsmöglichkeiten gegeben.

8.1 Wesentliche Resultate dieser Arbeit

In dieser Arbeit wurden nichtnegative Rangfaktorisierung und approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierungen unter Verwendung einer niedrigdimensionalen Darstellung untersucht. Dabei wurden insbesondere Algorithmen für Matrizen vom Rang 3 und 4 entwickelt und analysiert.

Die nichtnegative Rangfaktorisierung von Matrizen $D \in \mathbb{R}^{k \times n}$ vom Rang s wurde in Kapitel 3 allgemein geometrisch beschrieben. Die analytischen Ansätze wurden erstmals für approximativ nichtnegative Matrixfaktorisierungen erweitert. Dies ermöglicht die Untersuchung der Menge der zulässigen Lösungen auch für Matrizen von Messdaten, für die etwa aufgrund von Störungen und Rauschen keine nichtnegativen Matrixfaktorisierungen existieren.

Für Rang-3-Matrizen wurde mit dem line-moving Algorithmus ein geometrisches Verfahren angegeben, um die Menge der zulässigen Lösungen einer approximativ nichtnegativen Matrixfaktorisierung anzunähern. Diese Methode kann als Erweiterung des Tangentalgorithmus [14] aufgefasst werden. Sie schlägt eine Brücke zwischen den analytischen Ansätzen zur Beschreibung der Menge der zulässigen Lösungen und der Konstruktion der AFS im Fall von Störungen.

Als weiterer Schwerpunkt der Arbeit kann die Variation des Strahlenalgorithmus mit geometrischer Verbesserung zur Approximation der Menge zulässiger Lösungen für Matrizen vom Rang 4 genannt werden. Die numerischen Beispiele zeigen, dass durch die Kombination von geometrischen Ansätzen und Optimierungsmethoden kürzere Rechenzeiten und

eine höhere Approximationsgenauigkeit erreicht werden können.

In Kapitel 7 wurde erstmals die topologische Struktur der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen vom Rang 3 und 4 analysiert. Dabei wurde insbesondere die Anzahl der Zusammenhangskomponenten der AFS untersucht. In chemometrischen Arbeiten sind vielfach Beispiele für Mengen zulässiger Lösungen zu Rang-3-Matrizen mit einer oder drei Zusammenhangskomponenten dargestellt, siehe beispielsweise [14, 49, 57]. Es konnte jedoch gezeigt werden, dass es nichtnegative Rang-3-Matrizen gibt, deren AFS aus $3m$ Zusammenhangskomponenten besteht, wobei m eine beliebige natürliche Zahl ist. Dies zeigt weiter, dass numerische Methoden, die darauf basieren, dass die Menge der zulässigen Lösungen aus einer oder drei Zusammenhangskomponenten besteht, in diesen Fällen nur eine Teilmenge der AFS approximieren können.

8.2 Ausblick

Aus den Ergebnissen dieser Arbeit können eine Reihe weiterer Fragestellungen und Anwendungen abgeleitet werden. Drei Beispiele werden im Folgenden vorgestellt.

8.2.1 Kombinationen von geometrischen Ansätzen und Optimierungsmethoden zur Approximation der AFS

In Kapitel 6 wurde der Strahlenalgorithmus zur Approximation der Menge der zulässigen Lösungen für Matrizen vom Rang 4 eingesetzt. Mit der geometrischen Zielfunktion f_{geo} (5.3) unter Verwendung der geometrischen Verbesserung wurden für das betrachtete Modellproblem bessere Ergebnisse erzielt als mit der Zielfunktion f_{NMF} (5.2). Es wäre möglich, die Funktionen f_{geo} und f_{NMF} zu verbinden. Es könnte etwa die Nichtnegativität eines Faktors mittels des Ansatzes über die direkte Faktorisierung, die in Bemerkung 2.13 beschrieben wurde, erreicht werden, während für den zweiten Faktor der geometrische Zugang verwendet wird.

Außerdem könnten beide Zielfunktionen zur Approximation des inneren Randes der AFS nacheinander ausgeführt werden. Im Strahlenalgorithmus würde die Zielfunktion f_{NMF} dann solange eingesetzt werden, wie entlang eines Strahles Punkte der AFS gefunden werden. Liefert diese Zielfunktion im nächsten Schritt nicht den Wert Null, könnte untersucht werden, ob dies unter Verwendung der Zielfunktion f_{geo} erreicht wird.

Weiterhin könnten durch geometrische Eigenschaften der AFS Bereiche des äußeren Polytops bestimmt werden, innerhalb derer keine Punkte der AFS liegen können. Der Simplex-Rotations Algorithmus [13] erlaubt dies etwa im Fall von Rang-3-Matrizen. Eine Erweiterung für Matrizen höheren Ranges könnte den Aufwand zur numerischen Approximation der AFS deutlich reduzieren.

8.2.2 Die nichtnegative Matrixfaktorisierung bei nicht vollem Rang der Faktoren

Für nichtnegative Matrizen vom Rang 3 kann der nichtnegative Rang mittels des Algorithmus von Aggarwal bestimmt werden [3]. Dazu wird ein Polygon mit minimaler Eckenanzahl bestimmt, das zwischen den Polygonen INNPOL und FIRPOL eingebettet ist [3]. Die Konstruktionen sind ähnlich zu denen im Tangentialalgorithmus und könnten erweitert werden, um die Menge aller Faktorisierungen $D = CA$ minimalen Ranges zu einer Rang-3-Matrix D zu beschreiben. Diese Menge kann analog zur AFS für verschiedene Skalierungen $w^T x = 1$ definiert werden.

Definition 8.1. Es sei D eine Rang- s -Matrix mit nichtnegativem Rang s_+ , deren abgeschnittene Singulärwertzerlegung vom Rang s durch $D = U\Sigma V$ gegeben ist. Die Menge der zulässigen Lösungen der nichtnegativen Faktorisierung minimalen Ranges von D ist in der Skalierung $w^T x = 1$ durch die Menge

$$\mathcal{N} = \left\{ t \in \mathbb{R}^{s-1} : \exists T \in \mathbb{R}^{s+ \times s}, \exists C \in \mathbb{R}^{k \times s+} : \text{rank}(T) = s, \right. \\ \left. T(1, 2 : s) = t^T, TV^T \geq 0, C \geq 0, CTV^T = D, w^T TV^T = e^T \right\} \quad (8.1)$$

definiert.

Durch die Matrizen $C \in \mathbb{R}^{k \times s+}$ und $T \in \mathbb{R}^{s+ \times s}$ ist eine nichtnegative Faktorisierung der Matrix D in der Form

$$D = C \underbrace{TV^T}_{=A}$$

bestimmt. Falls die Matrix $U\Sigma T^+$ nichtnegativ ist, kann für C die Matrix $C = U\Sigma T^+$ gewählt werden. Nach den Moore-Penrose Axiomen [26] gilt

$$TT^+T = T$$

und da T vollen Rang hat, ist $T^+T = I$ erfüllt. Es folgt $CTV^T = U\Sigma T^+TV^T = U\Sigma V^T = D$.

Die skalierten Zeilen der Matrix D sind Konvexkombinationen der skalierten Zeilen der Matrix A , wie aus der Gleichung

$$1 = \frac{D(i, :)w}{D(i, :)w} = \sum_{j=1}^{s+} \frac{C(i, j)}{D(i, :)w} \underbrace{A(j, :)w}_{=1} = \sum_{j=1}^{s+} \frac{C(i, j)}{D(i, :)w} \quad (8.2)$$

folgt. Die Einträge von C entsprechen somit Linearkoeffizienten in der Konvexkombination. Wenn der nichtnegative Rang s_+ von D größer als der Rang von D ist, müssen die Linearkoeffizienten nicht eindeutig bestimmt sein. Das bedeutet, dass es zu einem Faktor A mehrere mögliche nichtnegative Faktoren C geben kann, für die $D = CA$ erfüllt ist.

Die Menge \mathcal{N} der zulässigen Lösungen der nichtnegativen Faktorisierung minimalen Ranges könnte hinsichtlich geometrischer Eigenschaften analog zur Menge \mathcal{M} der zulässigen Lösungen der nichtnegativen Rangfaktorisierungen untersucht werden. Die numerischen Methoden zur Approximation der AFS \mathcal{M} können für die Menge \mathcal{N} erweitert werden, wie in einer Arbeit von M. Sawall [51] dargestellt werden soll.

8.2.3 Die nichtnegative Tensorfaktorisierung

Matrixfaktorisierungen können zur Beschreibung bilinearer Modelle genutzt werden. Als ein Beispiel wurde das Gesetz von Lambert-Beer in Kapitel 2.3.1 detailliert betrachtet. Zur Beschreibung multilinearer Modelle können allgemein Tensorfaktorisierung angewendet werden.

Definition 8.2 (Tensor [17]). Die Elemente \underline{Y} der Menge $\mathbb{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$ werden Tensoren der Ordnung N genannt. Dabei gilt $0 < I_j \in \mathbb{N}$ für $1 \leq j \leq N$.

Tensoren, deren Ordnung größer als 2 ist, können sich auch aus den Messdaten zu bilinearen Modellen ergeben, wenn etwa die Messungen unter veränderten Anfangsbedingungen

wiederholt werden. Werden zum Beispiel im Verlaufe einer chemischen Reaktion spektroskopische Messungen über einem festen Zeit×Wellenlängen Gitter durchgeführt und die Messungen für veränderte Anfangskonzentrationen auf demselben Gitter wiederholt, können die Messergebnisse in einem Tensor der Ordnung 3 zusammengefasst werden. Die erste Ordnung beschreibt den Zeitpunkt der Messung nach dem Startpunkt des Experiment, die zweite Ordnung die betrachtete Wellenlänge und die dritte Ordnung die Wiederholung des Experiments. Die Messungen erfolgen zu k Zeitpunkten nach dem Startpunkt des jeweiligen Experiments und für n verschiedene Wellenlängen. Zudem werden ℓ Wiederholungen des Experiment durchgeführt. Sollen nun die Konzentrationsprofile und Spektren der Reinkomponenten bestimmt werden, kann der Tensor in Matrixform gebracht werden und die Menge der zulässigen Lösungen dieser Matrix bestimmt werden, vergleiche zum Beispiel [63]. Dazu werden die Matrizen, die durch $\underline{Y}(:, :, i) \in \mathbb{R}^{k \times n}$ für $1 \leq i \leq \ell$ gegeben sind untereinander zu einer Matrix $D \in \mathbb{R}^{(k\ell) \times n}$ angeordnet.

Im Allgemeinen kann ein Tensor \underline{Y} in Matrixform dargestellt werden, indem dem Tensorelement (i_1, i_2, \dots, i_N) das Element (i_ℓ, j) , $1 \leq \ell \leq N$ der Matrix Y zugeordnet wird. Dabei gilt

$$j = 1 + \sum_{p \neq \ell} J_p, \quad \text{mit} \quad J_p = \begin{cases} 1, & \text{falls } p = 1 \text{ oder falls } p = 2 \text{ und } \ell = 1 \\ \prod_{m \neq \ell}^{p-1} I_m & \text{sonst,} \end{cases}$$

vergleiche [17]. Diese Darstellung erlaubt es Methoden zur nichtnegativen Matrixfaktorisierung auch auf Tensoren anzuwenden.

In dem oben beschriebenen Beispiel zu den spektroskopischen Messungen ist die Faktorisierung $D = \bar{C}A$ gesucht. Die Zeilen von A entsprechen den Diskretisierungen der Reinspektren und die Matrix \bar{C} setzt sich aus Matrizen $C_i \in \mathbb{R}^{k \times s}$ $i \in \{1, \dots, \ell\}$ in der Form

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_\ell \end{pmatrix}$$

zusammen. Dabei ist s die Anzahl der chemischen Komponenten. Die Matrix C_i , $i \in \{1, \dots, \ell\}$ enthält spaltenweise die Konzentrationen der chemischen Komponenten in der i -ten Wiederholung des Experiments. Dieser Faktorisierungsansatz erlaubt es somit, die Messungen zu den unterschiedlichen Anfangsbedingungen des Experiments simultan auszuwerten.

Das oben beschriebene Vorgehen bildet die Grundlage des *PARAFAC*-Modells (parallel factor analysis) [15], das eine der grundlegenden Methoden im Bereich der Tensorfaktorisierung darstellt. Im Zusammenhang mit der Analyse spektroskopischer Messdaten wurden erstmals in [63] die Matrixform eines Tensors verwendet. Für weitere Informationen und Beispiele siehe [2].

Literaturverzeichnis

- [1] H. Abdollahi, M. Maeder und R. Tauler. Calculation and meaning of feasible band boundaries in multivariate curve resolution of a two-component system. *Anal. Chem.*, 81(6):2115–2122, 2009.
- [2] E. Acar und B. Yener. Unsupervised multiway data analysis: a literature survey. *TKDE*, 21(1):6–20, 2009.
- [3] A. Aggarwal, H. Booth, J. O’Rourke und S. Suri. Finding minimal convex nested polygons. *Inform. Comput.*, 83:98–110, 1989.
- [4] S. Arora, R. Ge, R. Kannan und A. Moitra. Computing a nonnegative matrix factorization – provably. In *Proceedings of the Forty-fourth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, STOC ’12, pages 145–162. ACM, 2012.
- [5] M. Asteris, D. Papailiopoulos und A. G. Dimakis. Orthogonal NMF through subspace exploration. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, 28, pages 343–351. Curran Associates, Inc., 2015.
- [6] R. B. Bapat und T. E. S. Raghavan. *Nonnegative matrices and applications*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [7] C. B. Barber, D. P. Dobkin und H. Huhdanpaa. The quickhull algorithm for convex hulls. *ACM Trans. Math. Softw.*, 22(4):469–483, 1996.
- [8] S. Basu, R. Pollack und M.-F. Roy. On the combinatorial and algebraic complexity of quantifier elimination. *J. Assoc. Comput. Mach.*, 43(6):1002–1045, 1996.
- [9] A. Berman und R. J. Plemmons. *Nonnegative matrices in the mathematical sciences*. Academic Press, Inc., New York, 1994.
- [10] M. W. Berry, M. Browne, A. N. Langville, V. P. Pauca und R. J. Plemmons. Algorithms and applications for approximate nonnegative matrix factorization. *Comput. Stat. Data Anal.*, 52(1):155–173, 2007.
- [11] S. Beyramysoltan, H. Abdollahi und R. Rajkó. Newer developments on self-modeling curve resolution implementing equality and unimodality constraints. *Anal. Chim. Acta*, 827:1–14, 2014.
- [12] J. F. Bonnans, J. C. Gilbert, C. Lemaréchal und C. A. Sagastizábal. *Numerical optimization: Theoretical and practical aspects*. Springer, Berlin, 2006.
- [13] O. S. Borgen, N. Davidsen, Z. Mingyang und Ø. Øyen. The multivariate N-component resolution problem with minimum assumptions. *MCA*, 89:63–73, 1986.
- [14] O. S. Borgen und B. R. Kowalski. An extension of the multivariate component-resolution method to three components. *Anal. Chim. Acta*, 174:1–26, 1985.

- [15] R. Bro. PARAFAC. Tutorial and applications. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 38:149–171, 1997.
- [16] R. B. Cattell. A biometrics invited paper. Factor analysis: An introduction to essentials I. The purpose and underlying models. *Biometrics*, 21(1):190–215, 1965.
- [17] A. Cichocki, R. Zdunek, A. H. Phan und S.-I. Amari. *Nonnegative matrix and tensor factorization*. John Wiley & Sons, Ltd, West Sussex, 2009.
- [18] J. E. Cohen und U. G. Rothblum. Nonnegative ranks, decompositions, and factorizations of nonnegative matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 190:149–168, 1993.
- [19] G. Cybenko und V. Crespi. Learning hidden markov models using nonnegative matrix factorization. *IEEE Trans. Inf. Theory*, 57(6):3963–3970, 2011.
- [20] G. Das und D. Joseph. The complexity of minimum convex nested polyhedra. In *Proc. of the 2nd Canadian Conference on Computational Geometry*, pages 296–301, 1990.
- [21] J. E. Dennis, Jr., D. M. Gay und R. E. Welsch. Algorithm 573: NL2SOL - An adaptive nonlinear least-squares algorithm [E4]. *ACM Trans. Math. Softw.*, 7(3):369–383, 1981.
- [22] B. Dong, M. M. Lin und M. T. Chu. Nonnegative rank factorization—a heuristic approach via rank reduction. *Numerical Algorithms*, 65(2):251–274, 2014.
- [23] D. L. Donoho und V. C. Stodden. When does non-negative matrix factorization give correct decomposition into parts? In *Advances in neural information processing systems 16: Proceedings of the 2003 conference*, 2004.
- [24] G. Frobenius. Über Matrizen aus nicht negativen Elementen. *S.-B. Preuss Acad. Wiss.*, pages 456–477, 1912.
- [25] N. Gillis und F. Glineur. On the geometric interpretation of the nonnegative rank. *Linear Algebra Appl.*, 437:2685–2712, 2012.
- [26] A. Golshan, H. Abdollahi und M. Maeder. Resolution of rotational ambiguity for three-component systems. *Anal. Chem.*, 83(3):836–841, 2011.
- [27] A. Golshan, M. Maeder und H. Abdollahi. Determination and visualization of rotational ambiguity in four-component systems. *Anal. Chim. Acta*, 796:20–26, 2013.
- [28] G. H. Golub und C. F. Van Loan. *Matrix computations*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1996.
- [29] M. Hanke-Bourgeois. *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. Vieweg + Teubner, Wiesbaden, 2009.
- [30] P. O. Hoyer. Non-negative matrix factorization with sparseness constraints. *J. Mach. Learn. Res.*, 5:1457–1469, 2004.
- [31] A. Juan, M. Maeder, M. Martínez und R. Tauler. Combining hard- and soft-modelling to solve kinetic problems. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 54:123–141, 2000.

- [32] A. Juan, Y. Vander Heyden, R. Tauler und D. L. Massart. Assessment of new constraints applied to the alternating least squares method. *Anal. Chim. Acta*, 346:307–318, 1997.
- [33] A. Jürß, M. Sawall und K. Neymeyr. On generalized Borgen plots. I: From convex to affine combinations and applications to spectral data. *J. Chemom.*, 29(7):420–433, 2015.
- [34] A. Jürß, M. Sawall und K. Neymeyr. On generalized Borgen plots II: The line-moving algorithm and its numerical implementation. *J. Chemom.*, 30(11):636–650, 2016.
- [35] J. Kennedy und R. Eberhart. Particle swarm optimization. In *Proceedings of the Fourth IEEE International Conference on Neural Networks, Perth, Australia*, page 1942–1948, 1995.
- [36] H. Kim und H. Park. Nonnegative matrix factorization based on alternating non-negativity constrained least squares and active set method. *SIMAX*, 30(2):713–730, 2008.
- [37] P. Knabner und W. Barth. *Lineare Algebra: Grundlagen und Anwendungen*. Springer, Berlin, 2012.
- [38] D. Kuang, C. Ding und H. Park. Symmetric nonnegative matrix factorization for graph clustering. In *Proceedings of the 2012 SIAM International Conference on Data Mining*, pages 106–117, 2012.
- [39] C. Kubis, D. Selent, M. Sawall, R. Ludwig, K. Neymeyr, W. Baumann, R. Franke und A. Börner. Exploring between the extremes: conversion-dependent kinetics of phosphite-modified hydroformylation catalysis. *Chem. Eur. J.*, 18(28):8780–8794, 2012.
- [40] H. Laurberg, M. G. Christensen, M. D. Plumley, L. K. Hansen und S. H. Jensen. Theorems on positive data: on the uniqueness of NMF. *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2008.
- [41] W. H. Lawton und E. A. Sylvestre. Self modeling curve resolution. *Technometrics*, 13(3):617–633, 1971.
- [42] D. D. Lee und H. S. Seung. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization. *Nature*, 401(6755):788–791, 1999.
- [43] M. Maeder und Y.-M. Neuhold. *Practical data analysis in chemistry*. Elsevier Science, Amsterdam, 2007.
- [44] E.R. Malinowski. *Factor analysis in chemistry*. John Wiley & Sons, Ltd., New York, 2002.
- [45] MATLAB. *version 8.0.0.783 (R2012b)*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2012.
- [46] H. Minc. *Nonnegative matrices*. John Wiley & Sons, Ltd., New York, 1988.
- [47] O. Perron. Zur Theorie der Matrices. *Mathematische Annalen*, 64:248–263, 1907.
- [48] R. Rajkó. Studies on the adaptability of different Borgen norms applied in self-modeling curve resolution (SMCR) method. *J. Chemom.*, 23(6):265–274, 2009.

- [49] R. Rajkó und K. István. Analytical solution for determining feasible regions of self-modeling curve resolution (SMCR) method based on computational geometry. *J. Chemom.*, 19(8):448–463, 2005.
- [50] J. Renegar. On the computational complexity and geometry of the first-order theory of the reals. Part I: Introduction. Preliminaries. The geometry of semi-algebraic sets. The decision problem for the existential theory of the reals. *Journal of Symbolic Computation*, 13(3):255–299, 1992.
- [51] M. Sawall. *Habilitationsschrift (in Vorbereitung)*. Einreichung voraussichtlich 2017.
- [52] M. Sawall, A. Börner, K. Kubis, D. Selent, R. Ludwig und K. Neymeyr. Model-free multivariate curve resolution combined with model-based kinetics: algorithm and applications. *J. Chemom.*, 26(10):538–548, 2012.
- [53] M. Sawall, C. Fischer, D. Heller und K. Neymeyr. Reduction of the rotational ambiguity of curve resolution techniques under partial knowledge of the factors. Complementarity and coupling theorems. *J. Chemom.*, 26(10):526–537, 2012.
- [54] M. Sawall, A. Jürß und K. Neymeyr. Users’ guide to FAC-PACK. www.math.uni-rostock.de/facpack/Download/facpack.pdf, 2014.
- [55] M. Sawall, A. Jürß und K. Neymeyr. FACPACK: A software for the computation of multi-component factorisations and the area of feasible solutions. www.math.uni-rostock.de/facpack/, 2017-03-08.
- [56] M. Sawall, C. Kubis, D. Selent, A. Börner und K. Neymeyr. A fast polygon inflation algorithm to compute the area of feasible solutions for three-component systems. I: concepts and applications. *J. Chemom.*, 27(5):106–116, 2013.
- [57] M. Sawall und K. Neymeyr. A fast polygon inflation algorithm to compute the area of feasible solutions for three-component systems. II: Theoretical foundation, inverse polygon inflation, and FAC-PACK implementation. *J. Chemom.*, 28(8):633–644, 2014.
- [58] M. Sawall und K. Neymeyr. A ray casting method for the computation of the area of feasible solutions for multicomponent systems: Theory, applications and FACPACK-implementation. *J. Chemom.*, 960:40–52, 2017.
- [59] E. Seneta. *Non-negative matrices and Markov Chains*. Springer, New York, 2006.
- [60] Y. Shi und R. Eberhart. A modified particle swarm optimizer. In *Evolutionary Computation Proceedings, IEEE World Congress on Computational Intelligence, Anchorage, Alaska*, pages 69–73, 1998.
- [61] A. N. Skvortsov. Estimation of rotation ambiguity in multivariate curve resolution with charged particle swarm optimization (cPSO-MCR). *J. Chemom.*, 28(10):727–739, 2014.
- [62] G. W. Stewart. On the early history of the singular value decomposition. *SIAM Review*, 35(4):551–566, 1993.
- [63] R. Tauler, A. Smilde und B. Kowalski. Selectivity, local rank, three-way data analysis and ambiguity in multivariate curve resolution. *J. Chemom.*, 9(1):31–58, 1995.

- [64] S. A. Vavasis. On the complexity of nonnegative matrix factorization. *SIOPT*, 20(3):1364–1377, 2009.
- [65] M. Vosough, C. Mason, R. Tauler, M. Jalali-Heravi und M. Maeder. On rotational ambiguity in model-free analyses of multivariate data. *J. Chemom.*, 20(6-7):302–310, 2006.
- [66] R. Wets. *Grundlagen konvexer Optimierung*. Springer, Berlin, 2013.
- [67] W. Xu, X. Liu und Y. Gong. Document clustering based on non-negative matrix factorization. In *Proceedings of the 26th Annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval*, SIGIR '03, pages 267–273. ACM, 2003.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich meinen Dank an diejenigen richten, die mich während der Zeit meiner Promotion unterstützt haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Neymeyr für die fachliche Betreuung und die zahlreichen anregenden Gespräche, die die Gestalt dieser Arbeit mitgeprägt haben. Durch seine Hinweise und Anmerkungen haben die Darstellungen in den gemeinsamen Veröffentlichungen an Präzision gewonnen und durch ihn haben die Arbeiten ihren Feinschliff erhalten. Insbesondere die Auszeichnung der Arbeit „*On generalized Borgen plots. I: From convex to affine combinations and applications to spectral data*“ mit dem Kowalski-Preis wäre ohne seine Unterstützung nicht denkbar gewesen.

Ich danke den Kollegen der Arbeitsgruppe Numerische Mathematik für die stets gute Zusammenarbeit und fortwährende Unterstützung. Besonders möchte ich Herrn Dr. Matthias Sawall und Herrn Henning Schröder danken, die für fachliche Fragen und Diskussion immer ein offenes Ohr hatten. Herrn Alexander Fricke gilt mein Dank für das ausdauernde und gewissenhafte Korrekturlesen dieser Arbeit.

Meiner Familie, meinem Verlobten Jonathan und meinen Freunden danke ich für alle Ermutigung und Unterstützung in den letzten Jahren.

Für die finanzielle Unterstützung danke ich der Studienstiftung des deutschen Volkes.

*Sagt allezeit Gott, dem Vater, Dank für alles.
Epheser 5,20*