

Masterarbeit zum Thema "Analytical Boundary Curve Construction for the Solution Set of Nonnegative Matrix Factorisations"

Tomass Andersons, Institut für Mathematik
Betreuer/Erstgutachter: Prof. Dr. K. Neymeyr
Zweiter Gutachter: PD Dr. M. Sawall

In spektroskopischen Messdaten überlagern sich häufig die Signale verschiedener Quellen, und oft ist es für die Analyse essentiell, von den überlagerten Daten auf die zugrunde liegenden Quellterme zu schließen - ein sogenanntes blind-source-separation Problem liegt vor. Eine bekannte mathematische Methode zur Lösung einer solchen Aufgabenstellung ist die nichtnegative Matrixfaktorisierung. Dabei wird eine nichtnegative Matrix in das Produkt zweier nichtnegativer Matrizen (i.A. deutlich kleinerer Dimension) zerlegt. Nichtnegative Matrixfaktorisierungen werden etwa bei der Analyse spektroskopischer Daten eingesetzt, um von überlagerten Absorptionsmessungen im Sinne des Gesetzes von Lambert-Beer in Matrixformulierung auf die Konzentrationsprofile und Reinkomponentenspektren der beteiligten Spezies zu schließen. Typischerweise ist eine nichtnegative Matrixfaktorisierung, auch bei Vernachlässigung trivialen Mehrdeutigkeiten, nicht eindeutig und die Frage nach der Bestimmung aller möglicher Lösungen schließt sich an. In der Masterarbeit wird ein analytisches Vorgehen zur Bestimmung niedrigdimensionaler Darstellungen der Lösungsmenge untersucht. Es gilt den Rand, der aus Publikationen als set of feasible solutions bekannten Menge, analytisch zu bestimmen. An eine bekannte Methode anknüpfend, wird diese gezielt erweitert und verbessert. Insbesondere finden hierfür Zusammenhänge aus der Dualitätstheorie im Kontext nichtnegativer Matrixfaktorisierungen Anwendung.

