Специальный вычислительный практикум

с. н. с. Андрушевский Николай Матвеевич,

факультет ВМК МГУ

Аннотация

В основу практикума положено подробное изучение метода сингулярного разложения матриц и его применение к разнообразным задачам обработки результатов экспериментальных данных при изучении сложных физических процессов или их математического моделирования. Традиционные курсы линейной алгебры, читаемые в высших учебных заведениях, мало затрагивают тему разнообразного применения сингулярного разложения. В то же время алгоритм SVD (Singular Value Decomposition) входит в десятку наиболее важных алгоритмических достижений 20-го века. В этом смысле предложенный специальный вычислительный практикум является уникальным и не имеет аналогов в программах обучения на факультетах естественного профиля МГУ. Задания практикума выполняются в интерактивном режиме в среде программирования **MATLAB**. При минимальном объеме необходимого программирования студенты получают возможность провести серии различных вычислений для углубленного понимания рассматриваемых вопросов. Успешное выполнение заданий данного практикума восполняет пробел в образовании, необходимого современному научному исследователю.

Выполнению заданий вычислительного практикума способствует разработанное методическое пособие **Андрушевский Н. М.** “**Анализ устойчивости решений систем линейных алгебраических систем.(Теория и практические применения)”, М.:МАКС Пресс, 2008, С. 70**. В первой части пособия приводятся необходимые теоретические сведения из курса линейной алгебры. Подробно излагается *метод сингулярного разложения матриц*. Этот метод является наиболее эффективным для выяснения таких важных вопросов как идентификация плохой обусловленности (чувствительности к погрешностям в исходных данных) систем линейных алгебраических уравнений, определение типа и меры плохой обусловленности, вычисление псевдообратных матриц для матриц неполного ранга, нахождение оптимальных решений плохо-обусловленных систем уравнений с матрицами неполного ранга, вычисление размеров доверительной области приближенных решений и многое другое. Углубленное изучение возможностей метода сингулярного разложения матриц безусловно обогатит арсенал успешной работы каждого исследователя, занимающегося вопросами обработки экспериментальных данных при изучении сложных физических процессов или их математического моделирования, позволит получать достоверные результаты и обезопасит от получения псевдоэффектов при интерпретации численных результатов.

Во второй части методического пособия сформулированы задания практикума и указания по их выполнению.

Ниже приводится краткий перечень тестовых вопросов, на которые можно уверенно ответить только после изучения рассматриваемого круга вопросов. Заметим, что даже многие опытные вычислители-модельеры затрудняются дать обоснованные ответы.

Тестовые вопросы

1. Легко ли открыть “псевдоэффект”?

Решаются системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) $A\vec{x} = \vec{b}_i$, содержащие погрешности в компонентах векторов правой части. Пусть

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 7 \\ 4 & 3 \end{pmatrix}, \ \det(A) = 2.$$

Рассмотрим решения СЛАУ для различных векторов $\vec{b}_i$.

Пусть $\vec{b}_0 = \begin{pmatrix} 7 \\ 3 \end{pmatrix}$ – точные значения коэффициентов в правой части. Тогда

$\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ – точное решение системы.

Если коэффициенты содержат погрешности измерений, например

$\vec{b}_1 = \begin{pmatrix} 7.20 \\ 3.08 \end{pmatrix}$, то возмущенное решение будет

$$\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 0.02 \\ 1.00 \end{pmatrix}.$$

Пусть при более тщательном измерении коэффициентов имеем

$\vec{b}_2 = \begin{pmatrix} 7.00 \\ 3.06 \end{pmatrix}$. Тогда

$$\vec{x}_2 = \begin{pmatrix} -0.21 \\ +1.30 \end{pmatrix}.$$

Этот результат может служить основой интерпретации **псевдоэффекта**.

Очевидно, что $\left\|\vec{b}_0 - \vec{b}_2\right\| << \left\|\vec{b}_0 - \vec{b}_1\right\|$, однако

$\left\|\vec{x}_0 - \vec{x}_2\right\| >> \left\|\vec{x}_0 - \vec{x}_1\right\|$!!!

Как объяснить этот эффект: *меньшие* погрешности в исходных данных вызвали *большее* возмущение в решении, чем *большие* погрешности?
Для каких матриц будут иметь место аналогичные эффекты ?
Указать класс матриц таких, что если

$\left\|\vec{b}_0 - \vec{b}_2\right\| < \left\|\vec{b}_0 - \vec{b}_1\right\|$, **то и** $\left\|\vec{x}_0 - \vec{x}_2\right\| < \left\|\vec{x}_0 - \vec{x}_1\right\|$.

2. Какие решения получают, решая *несовместные* системы уравнений?

Почему для всякой ***несовместной*** СЛАУ $A\vec{x} = \vec{b}$ система уравнений $A^T A\vec{y} = A^T\vec{b}$ всегда ***совместна*** и имеет, возможно, бесконечно много решений ?

<u>**Пример**</u>: Система уравнений $\begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}\vec{x} = \begin{pmatrix} 5 \\ 8 \end{pmatrix}$ – ***несовместна***. Однако система уравнений $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}\vec{y} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 \\ 8 \end{pmatrix}$ имеет ***бесконечно много*** решений: $\vec{y} = 21/50\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -3t \\ t \end{pmatrix}, t \in R$.

3. "Полезные ископаемые" на различных сериях экспериментальных данных.

Для описания функциональной зависимости выбрана некоторая линейная математическая модель $f(\vec{p},t) = \sum_{i=1}^{n_p} p_i\varphi_i(t)$. Оценки оптимальных параметров p_i для выбранной модели определяются путем решения задачи МНК. Предположим, что имеются **две серии** экспериментальных значений f_j, $j = 1, 2, ..., n$, $n > n_p$, измеренных в одних и тех же точках t_j, однако с существенно различными уровнями погрешностей измерений.

Могут ли совпадать значения оптимальных параметров, вычисленные по этим сериям измерений ?

Могут ли две серии измерений с одинаковым уровнем погрешностей, дать существенно различные оценки оптимальных параметров ?

4. Волшебное превращение Золушки в прекрасную Принцессу.

Пусть квадратная матрица A такая, что вектор-столбцы этой матрицы являются попарно ортогональными, т.е. $A^T A = D$, D – диагональная матрица. Однако вектор-строки этой матрицы могут и не быть попарно ортогональными, то есть матрица AA^T не является диагональной. Почему матрица $H = AD^+$, где D^+ – диагональная матрица с диагональными элементами $d_{ii}^+ = 1/\sqrt{d_{ii}}$ является унитарной, то есть

$$H^T H = HH^T = E, E \text{ – единичная матрица, } H^{-1} = H^T.$$

Этот факт – своеобразный "*бриллиант*" линейной алгебры !

Каковы его полезные применения?

Задачи специального вычислительного практикума

<u>**Задание 1**</u> (6 часов): **Основная теорема линейной алгебры и особенности отображений конечномерными линейными операторами.**

Цель задания: Задавая матрицы произвольного размера, выяснить геометрическую суть конечномерных отображений и метрические соотношения между основными ортогональными подпространствами, усвоить алгоритмы разложения векторов на ортогональные составляющие из ранговых и нуль-пространств рассматриваемых матриц, построить проекционные операторы на основные ортогональные подпространства.

Отчетность: Таблицы численных расчетов.

<u>**Задание 2**</u> (6 часов): **Сингулярное разложение матриц и топология конечномерных отображений.**

Цель задания: Изучив предварительно теоретический материал метода сингулярного разложения матриц, провести серию сингулярных разложений для матриц различных размеров, проанализировать спектры сингулярных чисел, определить размерности и параметры эллипсоидов при отображении единичных гиперсфер для матриц различного размера и ранга.

Отчетность: Таблицы численных расчетов

<u>**Задание 3**</u> (6 часов): Сингулярное разложение матриц и идентификация их плохой обусловленности.

Цель задания: Для заданных матриц провести сингулярное разложение, выяснить их принадлежность к типу обусловленности, определить меру обусловленности. Определить размерности и ортогональные базисы ранговых и нуль-пространств заданных и транспонированных к ним матриц. Изучить влияние погрешностей в исходных данных на решение для матриц различного типа обусловленности. Исследовать зависимость решений от ориентации вектора погрешностей в правых частях СЛАУ для матриц различного типа обусловленности.

Отчетность: Таблицы численных расчетов, графическое представление результатов.

<u>**Задание 4**</u> (6 часов): Определение оптимальных параметров и размеров доверительных областей для многопараметрических линейных математических моделей.

Цель задания: Для ряда наиболее популярных линейных математических моделей вычислить оптимальные параметры и размеры их доверительных областей при наличии погрешностей в исходных данных. Вычислить компоненты векторов погрешностей, ортогональных к ранговому пространству матрицы плана рассматриваемой математической модели. Убедиться, что эти компоненты не влияют на оценку значений оптимальных параметров. Численно смоделировать две серии “экспериментальных” данных с различными уровнями погрешностей, которые обеспечивают по методу МНК тождественные оценки оптимальных параметров.

Отчетность: Таблицы численных расчетов, графическое представление результатов.

Задание 5 (6 часов): Устойчивое решение больших систем линейных алгебраических уравнений при наличии погрешностей в исходных данных.

Цель задания: Применяя метод модификации сингулярных чисел, получить приближенное решение СЛАУ большой размерности. Оценить норму уклонения приближенного решения от истинного. Изучить влияния порога модификации на величину погрешности приближенного решения.

Отчетность: Таблицы численных расчетов

Задание 6 (6 часов): Применение сингулярного разложения матриц для оптимального сжатия изображений больших размеров.

Цель задания: Проведя оцифровку заданного изображения большого размера в виде числовой матрицы, провести сингулярное разложение матрицы. Изучив спектр сингулярных чисел, провести модификацию спектра и восстановить приближенное изображение. Выяснить влияние порога модификации сингулярных чисел на визуальное качество приближенных изображений. Вычислить коэффициент оптимального сжатия для передачи или хранения визуальной информации.

Отчетность: Таблицы численных расчетов, визуализация полученных результатов.

Задание 7 (6 часов): Минимизация нелинейных функционалов в методе МНК многих переменных модифицированным методом Ньютона-Гаусса (метод линеаризации) на основе модификации спектра сингулярных чисел матрицы Якоби.

Цель задания: Записать в аналитическом виде функционал МНК для *нелинейной* математической модели. На каждом шаге минимизации линеаризованной задачи (метод Ньютона-Гаусса) проводить модификацию спектра сингулярных чисел матицы Якоби. Провести сравнительный анализ эффективности классического метода Ньютона-Гаусса и ‘сингулярно модифицированного’ метода Ньютона-Гаусса.

Отчетность: Таблицы численных расчетов.