

Вычислительная физика, Осень 2020 ВШЭ. Задание 5.^a

1. **Восстановление зашумлённого изображения (30)** Скачайте файл, содержащий матрицы A и C (изображение и фильтр) и откройте его, используя numpy:

```
with np.load('data.npz') as data:
    A, C = data['A'], data['C']
```

Для работы с изображением нам будет удобно выстраивать элементы матрицы A в вектор-столбец a :

```
def mat2vec(A):
    h, w = A.shape
    a = np.zeros(h*w, dtype=A.dtype)
    A = np.flipud(A)
    for i, row in enumerate(A):
        a[i*w:i*w+w] = row
    return a
```

так что обратное преобразование – от вектора a в матрицу A осуществляется с помощью функции

```
def vec2mat(a, shape):
    h, w = shape
    A = np.zeros(shape, dtype=a.dtype)
    for i in range(h):
        A[i, :] = a[i*w:i*w+w]
    return np.flipud(A)
```

Изображение, содержащееся в матрице A получено из некоторого оригинала A_0 путем свёртки его с фильтром C и добавлением шума. Фильтр C осуществляет ‘размытие’ изображения, одновременно меняя его размер от 16×51 к 25×60 . Используя соответствующие вектора a и a_0 , эту операцию можно записать так

$$a_0 \rightarrow a = Ca_0 + \epsilon,$$

где ϵ - вектор, состоящий из нескоррелированных случайных величин из нормального распределения. Ваша задача состоит в том, чтобы располагая зашумленным изображением A и фильтром C , восстановить исходное изображение A_0 .

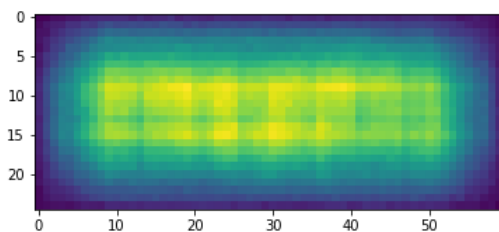


Рис. 1. Изображение A .

^a Дополнительно указаны: (количество баллов за задачу)[имя задачи на nbgrader]

- Постройте изображение, содержащееся в A (у вас должен получиться Рис. 1).
- Исследуйте действие фильтра C на изображения: составьте (на свой выбор) матрицу, и проверьте, что с соответствующим изображением делает фильтр C . Вам понадобятся операции $\mathbf{a} = \text{mat2vec}(A)$ и $A0 = \text{vec2mat}(\mathbf{a0}, \text{shape})$ для перехода от матричного к векторному представлению и обратно.
- Наивный способ восстановить изображение A_0 по изображению A состоит в том, чтобы решить систему $\mathbf{a} = C\mathbf{a}_0$ относительно вектора \mathbf{a}_0 . Какой является эта система: недо- или переопределённой? Используйте SVD матрицы C чтобы найти \mathbf{a}_0 и постройте соответствующее изображение A_0 .
- Для того, чтобы улучшить результат, поэкспериментируйте с количеством удержанных собственных значений при решении системы уравнений в предыдущем пункте. Что находится на изображении A_0 ?

2. Ранжирование веб-страниц (35) Одна из самых известных задач о вычислении собственных векторов – задача о ранжировании n веб-страниц. Подход, который вам нужно будет реализовать в этой задаче, был одним из главных в работе Google на раннем этапе. Всё, что мы собираемся использовать – структуру взаимных ссылок между страницами. **PageRank** определяется рекурсивно: важность i -й страницы определяется как среднее значение важностей всех страниц, которые ссылаются на i -ю. Обозначим важность i -й страницы p_i , тогда это определение может быть записано в виде линейной системы:

$$p_i = \sum_j \frac{p_j}{L(j)} l_{ij},$$

где $l_{ij} = 1$ если j -я страница ссылается на i -ю (в противном случае $l_{ij} = 0$), а $L(j)$ – количество исходящих ссылок со страницы j . Система может быть переписана в виде задачи на собственное значение:

$$\mathbf{p} = G\mathbf{p}, \quad G_{ij} = \frac{l_{ij}}{L(j)}.$$

Если в графе есть ‘подвешенные’ узлы (все элементы какого-то столбца равны нулю), то весь столбец заполняется числом $1/n$. Наконец, вводится параметр $0 < \beta < 1$ так что матрица G заменяется на

$$G \rightarrow \beta G + \frac{1-\beta}{n} \mathbf{e}\mathbf{e}^T,$$

где \mathbf{e} – вектор, состоящий из единиц. Обратите внимание, что задача свелась к нахождению собственного вектора \mathbf{p} матрицы G , отвечающего собственному значению 1. Можно показать [1], что 1 – максимально возможное собственное значение матрицы G .

- Придумайте самостоятельно небольшой граф связности (10 узлов), постройте соответствующие матрицы l и G и найдите численно собственный вектор, отвечающий **PageRank**.
- Скачайте файл, в котором представлен ориентированный граф, узлы которого составляют страницы stanford.edu, а направленные рёбра – ссылки между ними (граф задан матрицей смежности l). Распакуйте архив и загрузите его:

```
from scipy import sparse
def dataset2csr(filename, nodes, edges):
    rows = []; cols = []
    with open(filename, 'r') as f:
        for line in f.readlines()[4:]:
            o, d = (int(x)-1 for x in line.split())
            rows.append(d)
            cols.append(o)
    return(sparse.csr_matrix(([True]*edges, (rows, cols)), shape=(nodes, nodes)))

l = dataset2csr(filename='web-Stanford.txt', nodes = 281903, edges=2312497)
```

- Найдите PageRank для матрицы из предыдущего пункта. Для этого реализуйте степенную итерацию для нахождения собственного вектора, отвечающего максимальному собственному значению G . Возьмите $\beta = 0.8$.
- Итерируйте до тех пор, пока 1-норма изменения вектора-кандидата не станет меньше 10^{-4} . Сколько итераций понадобилось?

- Какому собственному значению отвечает найденный вектор и у какого узла наибольший PageRank?
- Докажите утверждение (*).

3. **Одномерный кристалл (30)** Рассмотрите одномерный кристалл с двумя атомами различной массы m и M в элементарной ячейке, состоящий из N элементарных ячеек (всего $2N$ атомов), замкнутых в кольцо (периодические граничные условия).

- Считая, что соседние атомы на кольце соединены одинаковыми пружинами с упругой константой $k = 1$, выпишите уравнения движения (уравнения Ньютона) на положения атомов x_i .
- Предполагая, что все атомы движутся с одной и той же частотой, $x_i(t) = u_i e^{-i\omega t}$, перепишите найденные выше уравнения в виде системы линейных уравнений на вектор u . Составьте матрицу A , спектр которой определяет частоты нормальных мод.
- Используя `np.linalg.eigh`, найдите спектр матрицы A (возьмите $N = 1000$ и $M/m = 2$). Постройте гистограмму собственных значений. Обратите внимание, что в спектре есть щель – ‘запрещенная’ область энергии внутри спектра, которая разделяет ‘разрешенную’ область на две части.
- Постройте пространственную структуру численно определённой нормальной моды u_i вблизи минимальной и максимально энергий спектра.
- Теперь рассмотрите цепочку со случайным k , взятым из однородного распределения на отрезке $[1, 10]$ и $M/m = 2$. Найдите её спектр (постройте гистограмму) и изобразите пространственную структуру какой-то моды u из середины спектра.