МЕТОДЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ

Бибердорф Элина Арнольдовна

Структура курса

* Спектр симметрических матриц
* Системы линейных алгебраических уравнений
* Матричные уравнения
* Спектр несимметрических матриц

Литература

Бибердорф Э.А. Гарантированная точность в прикладных задачах линейной алгебры

Бибердорф Э.А., Попова Н.И. Гарантированная точность современных алгоритмов линейной алгебры

Годунов С.К. Современные аспекты линейной алгебры

Повторить

* СЛАУ, число обусловленности
* Собственные значения и векторы
* Сингулярные числа и векторы
* Устойчивость решений дифференциальных и разностных уравнений.

Современные исследования:

1) физический или численный эксперимент $\Rightarrow$ исходные данные задачи;

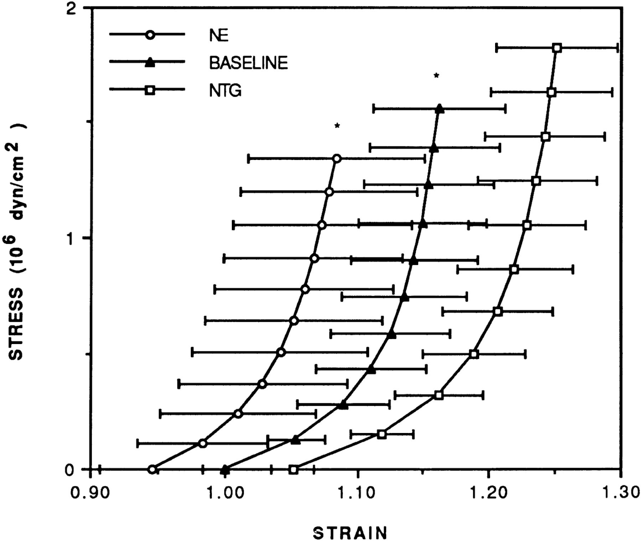
2) интерполяция этих данных на всю область;

3) дискретизация $\Rightarrow$ конечномерная математическая модель;

4) решение задачи линейной алгебры

$$\mathrm{Ax} = \mathrm{f} \qquad \text{или} \qquad \mathrm{Av} = \lambda \mathrm{v}.$$

Точность физического эксперимента



Действительные числа vs арифметика с плавающей запятой

$\gamma > 0$ - фиксированное целое положительное число
z - произвольное вещественное число

$z = \pm m(z)\gamma^{p(z)}$	$z_c = \pm m_c(z)\gamma^{p_c(z)}$
$p(z) \in \mathbb{Z}$ – порядок	$p_0 \le p_c(z) \le p_\infty$ - порядок
$m(z) = 0.a_1 a_2 a_3 \cdots = \\ = \frac{a_1}{\gamma} + \frac{a_2}{\gamma^2} + \frac{a_3}{\gamma^3} + \dots$ – мантисса	$m_c(z) = 0.a_1 a_2 \cdots a_k = \\ \frac{a_1}{\gamma} + \frac{a_2}{\gamma^2} + \dots \frac{a_k}{\gamma^k}$ – мантисса
$a_j \in \mathbb{N},\ 0 \le a_j < \gamma,\ 1 < j < \infty,$	$a_j \in \mathbb{N},\ 0 \le a_j < \gamma,\ 1 < j \le k$
Представление однозначно.	Константы p_0 , p_∞ и k – абсолютные

Основные параметры разрядной сетки

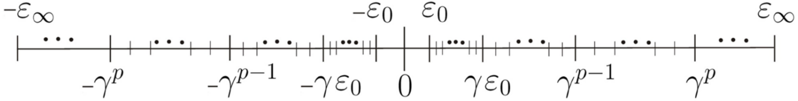
$\varepsilon_\infty = \gamma^{\mathrm{p}_\infty}\left(1 - \dfrac{1}{\gamma^{\mathrm{k}}}\right)$ – порог переполнения:

$\varepsilon_0 = \gamma^{\mathrm{p}_0 - 1}$ – порог машинного нуля:
если $0 < \mathrm{z} < \varepsilon_0$, то $\mathrm{z_{com}} = \varepsilon_0$ или $\mathrm{z_{com}} = 0$.

$\varepsilon_1 = \gamma^{1-\mathrm{k}}$ – шаг разрядной сетки на интервале от 1 до γ: минимальное из всех машинных чисел $\mathrm{z_c}$ таких, что

$$(1 + \mathrm{z_c})_\mathrm{c} > 1.$$

Если $0 < \mathrm{z} < \varepsilon_1$,
то $(1 + \mathrm{z})_\mathrm{c} = 1 + \varepsilon_1$ или $(1 + \mathrm{z})_\mathrm{c} = 1$.



Бинарные арифметические операции

Lemma

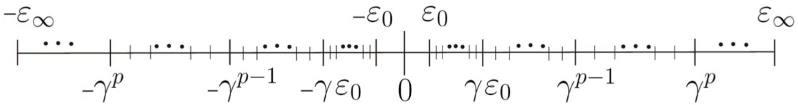
Если $\upsilon \in \{+, -, \times, :\}$ – обозначение для одной из бинарных операций, a, b – машинные числа, то

$$(\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})_{\mathrm{c}} = (\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})(1+\alpha) + \beta\,,$$

где $|\alpha| \leq \varepsilon_1,\ |\beta| \leq \varepsilon_0,\ \alpha\beta = 0.$

Если модуль результата операции больше чем ε_0, то машинная погрешность моделируется равенством

$$(\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})_{\mathrm{c}} = (\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})(1+\alpha).$$



Lemma

Если $\upsilon \in \{+, -, \times, :\}$ – обозначение для одной из бинарных операций, a, b – машинные числа, то

$$(\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})_{\mathrm{c}} = (\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})(1+\alpha) + \beta\,,$$

где $|\alpha| \le \varepsilon_1,\ |\beta| \le \varepsilon_0,\ \alpha\beta = 0$.

Если модуль результата операции больше чем ε_0, то машинная погрешность моделируется равенством

$$(\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})_{\mathrm{c}} = (\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})(1+\alpha).$$

Следствие.

$$|(\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})_{\mathrm{c}} - (\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b})| \le \begin{cases} \varepsilon_0, & \text{при} \quad |\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b}| < \varepsilon_0, \\ \varepsilon_1|\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b}|, & \text{при} \quad \varepsilon_0 \le |\mathrm{a}\ \upsilon\ \mathrm{b}| \le \varepsilon_\infty. \end{cases}$$

Метод обратного анализа погрешностей

Идея метода: интерпретация результата машинных операций как результат точного выполнения этих операций с возмущенными данными.

Например:

$$(\mathrm{a}+\mathrm{b})_{\mathrm{c}} = (\mathrm{a}+\mathrm{b})(1+\alpha) \Rightarrow (\mathrm{a}+\mathrm{b})_{\mathrm{c}} = \mathrm{a}(1+\alpha)+\mathrm{b}(1+\alpha).$$

Дж. фон Нейманом и Голдстайном (Goldstane) в 1947 г.
Дж. Х. Уилкинсоном (Wilkinson) в 1957 г.

Обратная устойчивость алгоритма

Пусть f(x) – вещественная функция
alg(x) – результат вычислений значения функции f(x) по некоторому алгоритму.
алгоритм обратно устойчив для f(x) if

$$\forall \mathrm{x} \quad \exists \triangle \mathrm{x}, \quad |\triangle \mathrm{x}| \leq \epsilon : \qquad \mathrm{alg}(\mathrm{x}) = \mathrm{f}(\mathrm{x} + \triangle \mathrm{x})$$

$\triangle$x – обратная ошибка.
Т.е. алгоритм дает точный результат $\mathrm{f}(\mathrm{x} + \triangle \mathrm{x})$ для возмущенных начальных данных $(\mathrm{x} + \triangle \mathrm{x})$.

Экстремальные ситуации

ПЕРЕПОЛНЕНИЕ и ИСЧЕЗНОВЕНИЕ ПОРЯДКА
Крушение ракеты Ариан 5 Европейского космического агентства, 4 июня 1996 г. - одна из самых дорогостоящих компьютерных ошибок в истории (оценки потерь варьируются от 360 до 500 млн долларов).

КАТАСТРОФИЧЕСКАЯ ПОТЕРЯ ТОЧНОСТИ
Потеря верных значащих цифр при получении малых чисел в результате сложения/вычитания больших чисел.
Пример
Вычислить e^x, $x < 0$ через ряд Тейлора

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

Пусть $\gamma = 10,\ k = 5,\ x = -5.5$

$$S_{25}(-5.5) = 0.0051040$$

Правильный ответ $e^{-5.5} = 0.00408677$

Экстремальные ситуации

ПЕРЕПОЛНЕНИЕ и ИСЧЕЗНОВЕНИЕ ПОРЯДКА

Крушение ракеты Ариан 5 Европейского космического агентства, 4 июня 1996 г. - одна из самых дорогостоящих компьютерных ошибок в истории (оценки потерь варьируются от 360 до 500 млн долларов).

КАТАСТРОФИЧЕСКАЯ ПОТЕРЯ ТОЧНОСТИ

Потеря верных значащих цифр при получении малых чисел в результате сложения/вычитания больших чисел.

Пример

Вычислить e^x, $x < 0$ через ряд Тейлора

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

Пусть $\gamma = 10$, $k = 5$, $x = -5.5$

$$S_{25}(-5.5) = 0.0051040$$

Правильный ответ $e^{-5.5} = 0.00408677$

$$e^x = \frac{1}{e^{-x}} \Rightarrow \frac{1}{S_{25}(5.5)} = 0.004087$$

Упрощение вида матриц

$$S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & b_M & d_M \end{pmatrix}, \qquad D = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & 0 \\ 0 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_M \\ 0 & & 0 & d_M \end{pmatrix}$$

$$S = S^* = Q^*AQ, \qquad D = PAQ$$

$Av = \lambda v$ $QSQ^*v = \lambda v$ $Sw = \lambda w$, где $Qw = v$	$Ax = f$ $P^*DQ^*x = f$ $Dy = g$, где $Qy = x$, $g = Pf$

Алгоритм Ланцоша

$A = A^*$

Шаг 0.

$u \in \mathbb{R}^n$

$h^{(1)} = u/\|u\|,$

$d_1 = (Ah^{(1)}, h^{(1)}),$

Шаг 1.

$v^{(2)} = Ah^{(1)} - d_1 h^{(1)},$

$b_2 = \|v^{(2)}\|,$

$h^{(2)} = v^{(2)}/b_2$, если $b_2 \neq 0$.

Алгоритм Ланцоша

Шаг 0.

$u \in \mathbb{R}^n$

$h^{(1)} = u/\|u\| \Rightarrow \|h^{(1)}\| = 1$

$d_1 = (Ah^{(1)}, h^{(1)}),$

Шаг 1.

$v^{(2)} = Ah^{(1)} - d_1 h^{(1)} \Rightarrow Ah^{(1)} = d_1 h^{(1)} + b_2 h^{(2)}$

$b_2 = \|v^{(2)}\|,$

$h^{(2)} = v^{(2)}/b_2$, если $b_2 \neq 0 \Rightarrow \|h^{(2)}\| = 1$

$$(h^{(1)}, h^{(2)}) = (h^{(1)}, (Ah^{(1)} - d_1 h^{(1)})/b_2) = ((h^{(1)}, Ah^{(1)}) - d_1 \|h^{(1)}\|^2)/b_2 = 0$$

Алгоритм Ланцоша

Шаг i.

$d_i = (Ah^{(i)}, h^{(i)})$,

$v^{(i+1)} = Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)} \Rightarrow Ah^{(i)} = b_i h^{(i-1)} + d_i h^{(i)} + b_{i+1} h^{(i+1)}$

$b_{i+1} = \|v^{(i+1)}\|$,

$h^{(i+1)} = v^{(i+1)}/b_{i+1}$, если $b_{i+1} \neq 0$.

$(h^{(i+1)}, h^{(i)}) = ((Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)})/b_{i+1}, h^{(i)}) =$

$((Ah^{(i)}, h^{(i)}) - d_i \|h^{(i)}\|^2 - b_i (h^{(i-1)}, h^{(i)}))/b_{i+1} = 0$

Шаг i.

$d_i = (Ah^{(i)}, h^{(i)})$,

$v^{(i+1)} = Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)} \Rightarrow Ah^{(i)} = b_i h^{(i-1)} + d_i h^{(i)} + b_{i+1} h^{(i+1)}$

$b_{i+1} = \|v^{(i+1)}\|$,

$h^{(i+1)} = v^{(i+1)}/b_{i+1}$, если $b_{i+1} \neq 0$.

$(h^{(i+1)}, h^{(i-1)}) = ((Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)})/b_{i+1}, h^{(i-1)}) =$

$((Ah^{(i)}, h^{(i-1)}) - d_i(h^{(i)}, h^{(i-1)}) - b_i\|h^{(i-1)}\|^2)/b_{i+1} =$

$((Ah^{(i)}, h^{(i-1)}) - b_i\|h^{(i-1)}\|^2)/b_{i+1} = ((h^{(i)}, Ah^{(i-1)}) - b_i\|h^{(i-1)}\|^2)/b_{i+1} =$

$((h^{(i)}, (b_{i-1}h^{(i-2)} + d_{i-1}h^{(i-1)} + b_i h^{(i)})) - b_i\|h^{(i-1)}\|^2)/b_{i+1} = 0$

Алгоритм Ланцоша

Шаг i.

$d_i = (Ah^{(i)}, h^{(i)})$,

$v^{(i+1)} = Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)} \Rightarrow Ah^{(i)} = b_i h^{(i-1)} + d_i h^{(i)} + b_{i+1} h^{(i+1)}$

$b_{i+1} = \|v^{(i+1)}\|$,

$h^{(i+1)} = v^{(i+1)}/b_{i+1}$, если $b_{i+1} \neq 0$.

$(h^{(i+1)}, h^{(i-2)}) = ((Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)})/b_{i+1}, h^{(i-2)}) =$

$((Ah^{(i)}, h^{(i-2)}) - d_i(h^{(i)}, h^{(i-2)}) - b_i(h^{(i-1)}, h^{(i-2)}))/b_{i+1} =$

$((Ah^{(i)}, h^{(i-2)}))/b_{i+1} = ((h^{(i)}, Ah^{(i-2)}))/b_{i+1} =$

$(h^{(i)}, (b_{i-2}h^{(i-3)} + d_{i-2}h^{(i-2)} + b_{i-1}h^{(i-1)}))/b_{i+1} = 0$

Шаг i.

$d_i = (Ah^{(i)}, h^{(i)})$,

$v^{(i+1)} = Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)} \Rightarrow Ah^{(i)} = b_i h^{(i-1)} + d_i h^{(i)} + b_{i+1} h^{(i+1)}$

$b_{i+1} = \|v^{(i+1)}\|$,

$h^{(i+1)} = v^{(i+1)}/b_{i+1}$, если $b_{i+1} \neq 0$.

$(h^{(i+1)}, h^{(j)}) =?$ при $1 \leq j < i - 2$ - УПР.

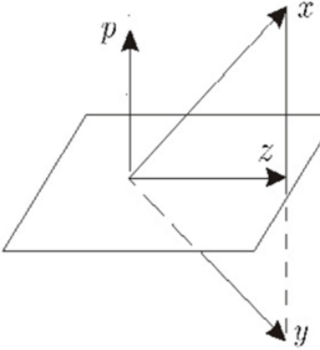
Алгоритм Ланцоша

$$A = A^*$$

$$\text{Шаг 1.}\ \begin{array}{l} u \in \mathbb{R}^n \\ h^{(1)} = u/\|u\|, \\ d_1 = (Ah^{(1)}, h^{(1)}), \\ v^{(2)} = Ah^{(1)} - d_1 h^{(1)}, \\ b_2 = \|v^{(2)}\|, \\ h^{(2)} = v^{(2)}/b_2, \text{ если } b_2 \neq 0. \end{array}$$

$$\text{Шаг i.}\ \begin{array}{l} d_i = (Ah^{(i)}, h^{(i)}), \\ v^{(i+1)} = Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)}, \\ b_{i+1} = \|v^{(i+1)}\|, \\ h^{(i+1)} = v^{(i+1)}/b_{i+1}, \text{ если } b_{i+1} \neq 0. \end{array}$$

Ортогональные отражения



$$y = x - 2\frac{(x, p)}{\|p\|^2}p = Px$$

$$P_{ij} = \delta_{ij} - \frac{2p_i p_j}{\|p\|^2}$$

$$P^*P = PP^* = P^2 = I$$

Двухдиагонализация

$A^{(0)} = A$, $A^{(1)} = P^{(1)}A^{(0)}$

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{N1}^{(1)} \end{pmatrix} = P^{(1)} \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} \\ \vdots \\ a_{N1}^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow A^{(1)} = \begin{pmatrix} d_1 & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & \dots & * \end{pmatrix}$$

$$(a_{11}^{(2)}, a_{12}^{(2)}, \dots, a_{1N}^{(2)}) = (a_{11}^{(1)}, a_{12}^{(1)}, \dots, a_{1N}^{(1)})Q^{(1)} = (d_1, b_2, 0, \dots, 0)$$

$$A^{(2)} = A^{(1)}Q^{(1)} = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & * & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \dots & * \end{pmatrix}$$

....

$D = PAQ$, где

$$P = P^{(N-1)} \dots P^{(2)}P^{(1)}, \qquad Q = Q^{(1)}Q^{(2)} \dots Q^{(N-2)}$$

Упражнения

* Двухдиагонализация прямоугольной матрицы
* Трехдиагонализация симметрической матрицы
* Трехдиагонализация кососимметрической матрицы

Симметрическая спектральная задача

$$\mathrm{Av} = \lambda \mathrm{v}, \quad \mathrm{A} = \mathrm{A}^*$$

Theorem (Вейль)

Пусть $\mathrm{A} = \mathrm{A}^*$, $\triangle\mathrm{A} = \triangle\mathrm{A}^*$, $\widetilde{\mathrm{A}} = \mathrm{A} + \triangle\mathrm{A}$. Тогда

$$\left.\begin{array}{ll} \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_{\mathrm{M}} & \text{– с.зн.A,} \\ \widetilde{\lambda}_1 \leq \widetilde{\lambda}_2 \leq \cdots \leq \widetilde{\lambda}_{\mathrm{M}} & \text{– с. зн. } \widetilde{\mathrm{A}} \end{array}\right. \implies \quad |\widetilde{\lambda}_{\mathrm{n}} - \lambda_{\mathrm{n}}| \leq \|\triangle\mathrm{A}\|$$

Симметрическая спектральная задача

$$\mathrm{Av} = \lambda \mathrm{v}, \quad \mathrm{A} = \mathrm{A}^*$$

Theorem (Вейль)

Пусть $\mathrm{A} = \mathrm{A}^*$, $\triangle \mathrm{A} = \triangle \mathrm{A}^*$, $\widetilde{\mathrm{A}} = \mathrm{A} + \triangle \mathrm{A}$. Тогда

$$\left.\begin{array}{ll} \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_\mathrm{M} & \text{– с.зн.A,} \\ \widetilde{\lambda}_1 \leq \widetilde{\lambda}_2 \leq \cdots \leq \widetilde{\lambda}_\mathrm{M} & \text{– с. зн. } \widetilde{\mathrm{A}} \end{array}\right. \implies |\widetilde{\lambda}_\mathrm{n} - \lambda_\mathrm{n}| \leq \mathbf{1} \|\triangle \mathrm{A}\|$$

Вариационный принцип Фишера-Куранта

$A = A^*$

$$\lambda_{n-k} = \min_{\substack{\|q_i\| = 1, \\ i = 1, \dots, k}} \max_{\substack{\|x\| \neq 0 \\ (q_i, x) = 0}} \frac{(Ax, x)}{(x, x)}$$

$$\lambda_{k+1} = \max_{\substack{\|q_i\| = 1, \\ i = 1, \dots, k}} \min_{\substack{\|x\| \neq 0 \\ (q_i, x) = 0}} \frac{(Ax, x)}{(x, x)}$$

Следствие вариационного принципа
$A = A^*$, $B = B^*$, $(Ax, x) \geq (Bx, x) \quad \Longrightarrow \lambda_j(A) \geq \lambda_j(B)$

Доказательство теоремы Вейля.

Из определения матричной нормы

$$\|\Delta A\| = \sup \frac{(\Delta A x, x)}{(x, x)}$$

$$\Rightarrow \quad (\Delta A x, x) \leq \|\Delta A\|(x, x) = (\|\Delta A\| x, x).$$

Используя это, получаем

$$(\widetilde{A} x, x) = ((A + \Delta A)x, x) = (Ax, x) + (\Delta A x, x) \leq$$

$$\leq (Ax, x) + \|\Delta A\|(x, x) = ((A + \|\Delta A\| \cdot I)x, x)$$

Применим следствие принципа Фишера-Куранта к матрицам $\widetilde{A}$ и $A + \|\Delta A\| \cdot I$:

$$\widetilde{\lambda}_j \leq \lambda_j + \|\Delta A\|, \qquad j = 1, \ldots, n.$$

Упражнение. Доказать оценку снизу

$$\widetilde{\lambda}_j \geq \lambda_j - \|\Delta A\|,$$

используя аналогичный подход.