

Матричные вычисления

Лекторы:

Игорь Лобанов



Язык:

Русский

Трудоемкость:

5 з.е.

Форма контроля:

Экзамен

Образовательная программа:

Теоретическая и экспериментальная физика

6 семестр

Пререквизиты:

Линейная алгебра

Программирование на Python

Лекции (ак.час)*	Практические занятия (ак.час)	Лабораторные занятия (ак.час)
32		32
*1 академический час = 45 минутам		

Целью курса является знакомство с численными методами для решения разнообразных линейных задач, включая операции с матрицами, вычисление разложений матриц, решение линейных систем, вычисление спектра. К задачам курса относятся формирование навыков написания программного кода для решения линейных задач, возникающих в вычислительной физике, машинном обучении и т.п., умений оптимально выбирать методы решения задач и обосновывать свой выбор, усвоение основных теоретических результатов о точности и устойчивости алгоритмов.

При успешном окончании курса студент будет уметь самостоятельно численно моделировать физические системы, которые удастся описать в виде некоторой матричной задачи, что покрывает большинство задач вычислительной физики. Студенты будут знать, как работает BLAS и LAPACK, что делает ядро MATLAB, и будут способны реализовывать алгоритмы линейной алгебры, отсутствующие в стандартных пакетах. Курс формирует навыки написания качественного кода на Python, одновременно обучая методам получения высокопроизводительного кода с использованием низкоуровневых вставок, JIT компиляции и учитывая особенности аппаратной архитектуры. Курс широко раскрывает следующие разделы численных методов: LU, QR, сингулярное, спектральное разложения матриц и другие, решение систем линейных уравнений, включая переопределенные и недоопределенные, теорию возмущений, симметричные и несимметричные проблемы собственных чисел, итерационные методы для решения систем и вычисления собственных значений, предобуславливание, параллельные алгоритмы.

Использование численных методов и высокопроизводительных вычислений является общим местом в современной физике, также как и во многих других областях, включая инженерные задачи, вычислительную химию, анализ социальных сетей, задачи искусственного интеллекта и др., использующие тот же математический аппарат. Знание матричных вычислений позволяет получать корректные результаты при решении перечисленных задач, оптимально выбирать вычислительные методы, что позволяет значительно увеличить производительность труда исследователей. Матричные вычисления являются одним из базовых и старейших курсов в вычислительных методах, однако данный курс адаптирован под современное аппаратное и программное обеспечение, а его содержание покрывает большинство алгоритмов, реализованных в современных программных библиотеках, и формирует основу для понимания свежих публикаций на тему курса.

Содержание курса

6 семестр

Матричные вычисления

Структура курса

Разделы	Лабораторные	Практика	Лекции (ак.ч.)	Лаб. (ак.ч)	Практика (ак.ч.)
1. Необходимые сведения об аппаратном и программном обеспечении					
Числа с плавающей запятой, стандарты. Особенности машинной реализации. FLOPS. Векторные машинные инструкции. Параллельное ускорение. Оценка ускорения матричного произведения с использованием векторных инструкций при разном порядке суммирования. Выбор порядка вычисления произведения цепочки матриц. Иерархии памяти, кеширование. Оптимизация произведения матриц с учетом времени доступа к памяти. Структуры памяти, шаг выборки, выравнивание. Умножение на симметричную матрицу. Кеш и блочные алгоритмы.	Лаб. работа “Аппаратные особенности вычислений”. Основы Python, пакеты NumPy, SciPy, JIT компиляция с помощью Numba. Параллельные вычисления и GIL. Оптимизация код и fastmath. Измерение объема кэша, эффективное использование кэша. Реализация наивного умножения матриц и алгоритма Штрассена.		2	2	
2. Основные понятия линейной алгебры					
Линейные пространства, базисы, линейные операторы, матрицы, образ, ядро, ранг, ортогональные пространства, проекторы, определители, собственные вектора и значения, скалярные произведения и нормы векторов, операторные нормы, эквивалентность норм, функции от операторов, производная, сходимости последовательностей векторов и операторов, обратные операторы и матрицы, гильбертовы пространства, самосопряженные, ортогональные и унитарные операторы. Возмущение оператора, ранг возмущения, формула Шермана-Моррисона-Вудбери, второе резольвентное тождество.		Практикум “Свойства матриц”. Доказательство матричных тождеств. Вычисление и оценка норм матриц. Приближенное нахождение решений по теории возмущений.	2	2	
3. Числа обусловленности, виды ошибок и SVD разложение					

Сингулярное (SVD) разложение, сингулярные числа, правые и левые сингулярные вектора. Ортогональные проекторы. Расстояние между подпространствами. CS-разложение матриц. Числа обусловленности матриц. Среднеквадратическая ошибка и покоординатная оценка погрешности решения линейной системы, оценки. Прямая и обратная ошибка. Практикум. работа "Свойства матриц II". Вычисление сингулярного разложения через норму оператора. Определение численного ранга системы. Решение недоопределенной системы. Вычисление прямой и обратной ошибок.			2		
4. Решение линейных систем общего вида, LU-разложение					
Треугольные матрицы. Преобразования Гаусса. Прямые и обратные подстановки. LU разложение. Применение LU разложения к решению систем и обращению матриц. Блочное LU разложения. Численная погрешность LU разложения. Разложение с перестановками. Оценки числа обусловленности по LU разложению. Хранение LU разложения в памяти.	Лаб. раб. "Метод прогонки и LU разложение", часть I. Уравнение Пуассона в 2D, дискретизация конечными разностями, сведение к системе. Решение библиотечными функциями SciPy, разреженные матрицы. Оценка времени работы, экстраполяция. Вычисление числа обусловленности матрицы, невязка, оценка точности решения.		2	2	
5. Линейные системы специального вида					
Симметрические и знакоопределенные матрицы. Диагональное преобладание. LDL-разложение симметричных матриц. Разложение Холецкого, его устойчивость. Ленточные матрицы, LU-разложение для ленточных матриц. Матрицы Гейзенберга. Трехдиагональные матрицы, метод прогонки. Блочные ленточные матрицы. Лаб. раб. "Метод прогонки и LU разложение", часть II. Собственная реализация блочных ленточных матриц, реализация LU разложения для них. Разложение Холецкого. Использование формулы Вудбери. Высокопроизводительная реализация решения уравнения Пуассона с периодическими и свободными граничными условиями.	Лаб. раб. "Метод прогонки и LU разложение", часть II. Собственная реализация блочных ленточных матриц, реализация LU разложения для них. Разложение Холецкого. Использование формулы Вудбери. Высокопроизводительная реализация решения уравнения Пуассона с периодическими и свободными граничными условиями.		4	2	
6. Матрицы Топлица и циркулянт					
Матрицы Топлица. Алгоритм Левинсона для решения системы с матрицей Топлица. Алгоритм Тренча для обращения матрицы Топлица. Циркулянт, свертка. Дискретное преобразование Фурье, его свойства. Решение системы с матрицей циркулянта с помощью преобразования Фурье. Вычисление определителей и собственных значений для матриц специального вида.	Лаб. раб. "Матрицы Топлица и циркулянт." Реализация алгоритма Левинсона на Python. Быстрое преобразование Фурье в SciPy, комплексный и вещественный вариант. Решение уравнения Пуассона в 2D с помощью БПФ.		4	2	

7. Ортогональные разложения и метод наименьших квадратов					
<p>Отражения Хаусхолдера и вращения Гивенса. QR-разложение. Разные представления QR разложения. Погрешность вычисления QR-разложения. Блочное QR-разложение. QR-разложение для матрицы Гейзенберга. Алгоритм Грама-Шмидта, устойчивый вариант, связь с QR-разложением. Метод наименьших квадратов, нормальное уравнение, решение через ортогональные разложения.</p>	<p>Лаб. раб. "Ортогональные разложения." Реализация отражений Хаусхолдера и поворотов Гивенса. Реализация QR разложения. Решения задачи регрессии методом наименьших квадратов. Сравнение точности решений сведением к нормальному уравнению и через QR разложение.</p>		2	2	
8. Несимметричная проблема собственных чисел					
<p>Собственные числа и инвариантные подпространства. Разложение Шура. Неунитарные преобразования, разложение Жордана. Теория возмущения для собственных значений. теорема Бауэра-Фике. Степенной метод, метод сдвига, обратные итерации. QR и LR итерации. Разложение Хессенберга. Обобщенные собственные значения. Обобщенное разложение Шура. Исчерпывание.</p>	<p>Лаб. раб. "Проблема собственных значений I". Реализация вычисления собственных значений: степенной метод, обобщенный степенной метод, метод сдвига. Библиотечные функции SciPy.</p>		2	2	
9. Симметричная проблема собственных значений					
<p>Спектральное разложение. Симметричное вещественное разложение Шура. Теорема Куранта-Фишера о минимаксе, следствия. Числа и вектора Ритца. Закон инерции Сильвестра. Метод итераций Рэлея. Ортогональные итерации. QR итерации. Приведение к трехдиагональному виду. Метод Якоби. Вычисление SVD разложения. Обобщенные собственные значения. CS разложение.</p>	<p>Лаб. раб. "Проблема собственных значений II." Приведение к трехдиагональному виду. Симметричный QR метод. Вычисление спектрального и сингулярного разложений. Библиотечные функции SciPy.</p>		4	4	
10. Функции от матриц					
<p>Функция от оператора. Метод собственных значений. Ряды Тейлора. Вычисление через матрицы Шура. Методы приближенного вычисления функция от матриц. Вычисление степеней матриц. Интегралы функций от матриц. Матричная экспонента. Аппроксимация Паде. Квадратный корень из матрицы. Матричный логарифм.</p>	<p>Лаб. раб. "Функции от матриц." Вычисление пропагатора и функции Грина. Аппроксимации.</p>		2	2	
11. Итерационные методы					
<p>Разреженные матрицы. Дискретизация уравнений в частных производных. Метод Якоби. Метод Гаусса-Зейделя. Сходимость. Метод проекций. Метод наискорейшего спуска.</p>	<p>Лаб. раб. "Решение систем итерационными методами I." Реализация метода Якоби. Условия останова. Решения уравнения Пуассона в 2D методом Якоби, скорость сходимости. Предобуславливание с помощью БПФ.</p>		2	2	
12. Метод подпространств Крылова					

Подпространства Крылова. Метод Арнольди. Метод полной ортогонализации, перезапуск. Неполная ортогонализация. GMRES. Алгоритм Ланцоша. Метод сопряженного градиента. Блочные варианты.	Лаб. раб. "Решение систем итерационными методами II." Метод сопряженного и бисопряженного градиента. Сходимость в разных нормах. Оценка и сравнение скорости сходимости метода Якоби, сопряженного градиента для нормального уравнения и бисопряженного градиента.		2	2	
13. Метод бисопряженных градиентов					
Метод биортогонализации Ланцоша. Метод бисопряженных градиентов. QMR алгоритм. Устойчивый вариант бисопряженных градиентов. Вариант без сопряженной матрицы. Нормальное уравнение. Вычисление седловой точки, метод Узавы, итерации Эрроу-Гурвица.					
14. Предобуславливание					
Предобуславливание. Сохранение симметрии. Эффективная реализация сопряженного градиента. Левое и правое предобуславливание GMRES. Предобуславливание нормального уравнения.	Лаб. раб. "Предобуславливание". Геометрические и алгебраические методы. Предобуславливание путем частичного LU разложения.		2	2	

Рекомендуемые ресурсы

1. Дж. Голуб, Ч. Ван Лоун. Матричные вычисления. — Москва: «Мир», 1999.
2. Итерационные методы для разреженных линейных систем. Том 2.: учеб. пособие / Саад Ю. — МГУ имени М.В. Ломоносова, 2014 — 306 с.
Дополнительная литература:
3. Matrix Computations, 4th ed. [Учеб. пособие] Gene H. Golub, Charles F. Van Loan. — Johns Hopkins Studies in the Mathematical Sciences, 2013 — 784 с.
4. Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd ed. [Электронный ресурс]: учеб. пособие / Yousef Saad. — Электрон. дан. — Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2003. — 567 с. — Режим доступа: <https://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html>

Политика оценивания

Оценочные средства дисциплины: домашнее задание, лабораторная работа, контрольная работа, коллоквиум, экзамен.

Курс проводится в течении одного семестра. В конце семестра проводится устный экзамен и учитываются баллы, полученные при выполнении и защите лабораторных работ и баллы за домашние задания. Для допуска к устному экзамену необходимо получить не менее 40 баллов за лабораторные работы (из 60 возможных). В течение семестра также проводятся две контрольные работы (по первой и второй части материала).

В конце семестра проводится экзамен, состоящий из двух теоретических вопросов и задачи.

Максимальное количество баллов за курс – 100.

Максимальное количество баллов за экзамен – 20 (min 8)

Максимальное количество баллов за лабораторные работы – 60 (min 40)

Максимальное количество баллов за контрольную работу - 10 (min 0)

Максимальное число баллов за домашние задания – 10 (min 0)

При невыполнении минимальных требований по любому из пунктов студент получает оценку «неудовлетворительно».

Итоговая оценка формируется исходя из количества баллов: от 90 до 100 – «отлично», от 74 до 90 – «хорошо», от 60 до 74 – «удовлетворительно».