Обработка астрометрических наблюдений

9. Редукция II: решение переопределенных систем линейных уравнений

кто: Семенцов В.Н.

когда: 9 апреля, 2021

Девизы

дано	система линейных уравнений с прямоугольной матрицей
знаем	(немного) линейную алгебру
можем	поставить дополнительные требования (стабилизаторы)
надо	получить устойчивое решение

План работы

составляем	матрицу плана и систему нормальных уравнений
обсуждаем	число обусловленности и системы полиномов
SVD	разложение матрицы плана
получаем	оценки значений параметров и их погрешности

План работы

составляем	матрицу плана и систему нормальных уравнений
обсуждаем	число обусловленности и системы полиномов
SVD	разложение матрицы плана
получаем	оценки значений параметров и их погрешности
ищем	подходящие библиотеки
проверяем	методы, используемые в «готовых решениях»

Матрица плана

Классическая задача линейного МНК:

$$\mathrm{A} \cdot \mathbf{x}^T = \mathbf{y}, \tag{1}$$

где A – т.н. матрица плана $M \times N$, содержащая базисные функции модели, вычисленные для каждого измерения ($a_{ij} = \varphi_j(t_i)$), $\mathbf{x}$ – вектор-столбец длины N («параметры пластинки»), $\mathbf{y}$ – вектор-столбец длины M (измерения). Обычно $M \gg N$.

Матрица плана

Классическая задача линейного МНК:

$$A \cdot \mathbf{x}^T = \mathbf{y}, \tag{1}$$

где A – т.н. матрица плана $M \times N$, содержащая базисные функции модели, вычисленные для каждого измерения ($a_{ij} = \varphi_j(t_i)$), $\mathbf{x}$ – вектор-столбец длины N («параметры пластинки»), $\mathbf{y}$ – вектор-столбец длины M (измерения). Обычно $M \gg N$.

В такой постановке задача **неразрешима**, особенно с учетом наличия погрешностей в измерениях. Необходимо добавлять условия. Чаще всего это — требование решения, **минимизирующего норму невязки**.

Нормальные уравнения

Домножим каждое уравнение системы на транспонированную матрицу плана:

$$A^T \cdot A \cdot \mathbf{x}^T = A^T \cdot \mathbf{y} \tag{2}$$

Матрица $A^T A$ — симметричная, неотрицательно определенная $N \times N$, правая часть — вектор длины N.
Для дальнейшего решения системы **нормальных** уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{lcl} a_{11}x_1 + \ldots + a_{1n}x_n & = & b_1 \\ \ldots & & \\ a_{m1}x_1 + \ldots + a_{mn}x_n & = & b_m \end{array} \right. , \tag{3}$$

которую можно записать в матричном виде:

$$Bx = b.$$

Решение методом Гаусса

Тогда, согласно свойству элементарных преобразований над строками, основную матрицу этой системы можно привести к ступенчатому виду (эти же преобразования нужно применять к столбцу свободных членов):

$$\left\{\begin{array}{rcl} \alpha_{1j_1}x_{j_1}+\alpha_{1j_2}x_{j_2}+\ldots+\alpha_{1j_r}x_{j_r}+\ldots+\alpha_{1j_n}x_{j_n} & = & \beta_1 \\ \alpha_{2j_2}x_{j_2}+\ldots+\alpha_{2j_r}x_{j_r}+\ldots+\alpha_{2j_n}x_{j_n} & = & \beta_2 \\ & \ldots & \\ \alpha_{rj_r}x_{j_r}+\ldots+\alpha_{rj_n}x_{j_n} & = & \beta_r \\ 0 & = & \beta_{r+1} \\ & \ldots & \\ 0 & = & \beta_m \end{array}\right. \tag{4}$$

где $\alpha_{1j_1},\ldots,\alpha_{rj_r}\neq 0$.

Решение методом Гаусса

Тогда, согласно свойству элементарных преобразований над строками, основную матрицу этой системы можно привести к ступенчатому виду (эти же преобразования нужно применять к столбцу свободных членов):

$$\left\{\begin{array}{rcl} \alpha_{1j_1}x_{j_1}+\alpha_{1j_2}x_{j_2}+\ldots+\alpha_{1j_r}x_{j_r}+\ldots+\alpha_{1j_n}x_{j_n} & = & \beta_1 \\ \alpha_{2j_2}x_{j_2}+\ldots+\alpha_{2j_r}x_{j_r}+\ldots+\alpha_{2j_n}x_{j_n} & = & \beta_2 \\ & \ldots & \\ \alpha_{rj_r}x_{j_r}+\ldots+\alpha_{rj_n}x_{j_n} & = & \beta_r \\ 0 & = & \beta_{r+1} \\ & \ldots & \\ 0 & = & \beta_m \end{array}\right. \tag{4}$$

где $\alpha_{1j_1},\ldots,\alpha_{rj_r}\neq 0$.
При этом будем считать, что базисный минор (ненулевой минор максимального порядка) основной матрицы находится в верхнем левом углу, то есть в него входят только коэффициенты при переменных $x_{j_1},\ldots,x_{j_r}$. Тогда переменные $x_{j_1},\ldots,x_{j_r}$ называются главными переменными. Все остальные называются свободными.

Если хотя бы одно число $\beta_i\neq 0$, где $i>r$, то рассматриваемая система

несовместна, т.е. у неё нет ни одного решения.

Решение методом Гаусса-2

Пусть $\beta_i = 0$ для любых $i > r$.
Перенесём свободные переменные за знаки равенств и поделим каждое из уравнений системы на свой коэффициент при самом левом x (α_{ij_i}, $i = 1, \ldots, r$, где $i-$ номер строки):

$$\begin{cases} x_{j_1} + \widehat{\alpha}_{1j_2} x_{j_2} + \ldots + \widehat{\alpha}_{1j_r} x_{j_r} = \widehat{\beta}_1 - \widehat{\alpha}_{1j_{r+1}} x_{j_{r+1}} - \ldots - \widehat{\alpha}_{1j_n} x_{j_n} \\ x_{j_2} + \ldots + \widehat{\alpha}_{2j_r} x_{j_r} = \widehat{\beta}_2 - \widehat{\alpha}_{2j_{r+1}} x_{j_{r+1}} - \ldots - \widehat{\alpha}_{2j_n} x_{j_n} \\ \ldots \\ x_{j_r} = \widehat{\beta}_r - \widehat{\alpha}_{rj_{r+1}} x_{j_{r+1}} - \ldots - \widehat{\alpha}_{rj_n} x_{j_n} \end{cases} \tag{5}$$

$$\widehat{\beta}_i = \frac{\beta_i}{\alpha_{ij_i}}, \tag{6}$$

$$\widehat{\alpha}_{ij_k} = \frac{\alpha_{ij_k}}{\alpha_{ij_i}} \tag{7}$$

где $i = 1, \ldots, r$, $k = i + 1, \ldots, n$.

Если свободным переменным системы (5) придавать все возможные значения и решать новую систему относительно главных неизвестных снизу вверх (то есть от нижнего уравнения к верхнему), то мы получим все решения этой системы. Так как она построена путём элементарных преобразований над исходной системой, то множества их решений совпадают.

Решение методом Гаусса-2

Пусть $\beta_i = 0$ для любых $i > r$.
Перенесём свободные переменные за знаки равенств и поделим каждое из уравнений системы на свой коэффициент при самом левом x (α_{ij_i}, $i = 1, \ldots, r$, где i – номер строки):

$$\begin{cases} x_{j_1} + \widehat{\alpha}_{1j_2} x_{j_2} + \ldots + \widehat{\alpha}_{1j_r} x_{j_r} = \widehat{\beta}_1 - \widehat{\alpha}_{1j_{r+1}} x_{j_{r+1}} - \ldots - \widehat{\alpha}_{1j_n} x_{j_n} \\ x_{j_2} + \ldots + \widehat{\alpha}_{2j_r} x_{j_r} = \widehat{\beta}_2 - \widehat{\alpha}_{2j_{r+1}} x_{j_{r+1}} - \ldots - \widehat{\alpha}_{2j_n} x_{j_n} \\ \ldots \\ x_{j_r} = \widehat{\beta}_r - \widehat{\alpha}_{rj_{r+1}} x_{j_{r+1}} - \ldots - \widehat{\alpha}_{rj_n} x_{j_n} \end{cases} \tag{5}$$

$$\widehat{\beta}_i = \frac{\beta_i}{\alpha_{ij_i}}, \tag{6}$$

$$\widehat{\alpha}_{ij_k} = \frac{\alpha_{ij_k}}{\alpha_{ij_i}} \tag{7}$$

где $i = 1, \ldots, r$, $k = i + 1, \ldots, n$.

Если свободным переменным системы (5) придавать все возможные значения и решать новую систему относительно главных неизвестных снизу вверх (то есть от нижнего уравнения к верхнему), то мы получим все решения этой системы. Так как она построена путём элементарных преобразований над исходной системой, то множества их решений совпадают.

Критерий совместности Упомянутое выше условие $\beta_i = 0$ для всех $i > r$ может быть сформулировано в качестве необходимого и достаточного условия совместности.

Норма матрицы

- Вещественное число, сопоставленное матрице A и обозначаемое $\|A\|$, называется *нормой матрицы* A, если выполнены аксиомы:

$$\begin{aligned} \|A\| > 0, \text{если} A \neq 0, \|0\| = 0, \\ \|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|, \\ \|A + B\| \leqslant \|A\| + \|B\|, \\ \|AC\| \leqslant \|A\| \|C\| \end{aligned}$$

Норма матрицы

- Вещественное число, сопоставленное матрице A и обозначаемое $\|A\|$, называется *нормой матрицы* A, если выполнены аксиомы:

$$\begin{aligned} \|A\| > 0, \text{если} A \neq 0, \|0\| = 0, \\ \|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|, \\ \|A + B\| \leqslant \|A\| + \|B\|, \\ \|AC\| \leqslant \|A\| \|C\| \end{aligned}$$

1 $\|A\|_1 = \max\limits_{1 \leqslant j \leqslant m} \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ij}|$

∞ $\|A\|_\infty = \max\limits_{1 \leqslant i \leqslant n} \sum\limits_{j=1}^{m} |a_{ij}|$

M $M(A) = \sqrt{nm} \max\limits_{i,j} |a_{ij}|$

спектральная $\|A\|_2 =$ максимальному сингулярному числу матрицы

евклидова $\|A\|_E = \left(\sum\limits_{i=1}^{n} \sum\limits_{j=1}^{m} |a_{ij}|^2 \right)^{1/2}$

Число обусловленности

- Для невырожденной матрицы величина $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ называется *числом обусловленности*, обозначается по-разному: cond, κ, μ.

Число обусловленности

- Для невырожденной матрицы величина $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ называется *числом обусловленности*, обозначается по-разному: cond, κ, μ.
- Как правило, если число обусловленности $\kappa(A) = 10^k$, то при вычислениях с такой матрицей можно потерять дополнительно до k значащих цифр.

Число обусловленности

- Для невырожденной матрицы величина $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ называется *числом обусловленности*, обозначается по-разному: cond, κ, μ.
- Как правило, если число обусловленности $\kappa(A) = 10^k$, то при вычислениях с такой матрицей можно потерять дополнительно до k значащих цифр.
- Рассмотрим две системы линейных уравнений:

  $Au = f$ — «основная»

  $(A + \Delta A)u = f + \Delta f$ — «близкая» к ней.
- Пусть A — линейный ограниченный обратимый оператор, действующий из полного пространства U. Пусть операторы A^{-1}, ΔA также ограничены, и $\|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| < 1$.
- Пусть u^* — решение первого уравнения, $u^* + \Delta u$ — решение второго уравнения.

Число обусловленности

- Для невырожденной матрицы величина $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ называется *числом обусловленности*, обозначается по-разному: cond, κ, μ.
- Как правило, если число обусловленности $\kappa(A) = 10^k$, то при вычислениях с такой матрицей можно потерять дополнительно до k значащих цифр.
- Рассмотрим две системы линейных уравнений:
  $Au = f$ — «основная»
  $(A + \Delta A)u = f + \Delta f$ — «близкая» к ней.
- Пусть A — линейный ограниченный обратимый оператор, действующий из полного пространства U. Пусть операторы A^{-1}, ΔA также ограничены, и $\|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| < 1$.
- Пусть u^* — решение первого уравнения, $u^* + \Delta u$ — решение второго уравнения.
- Тогда

$$\frac{\|\Delta u\|}{\|u^*\|} \leqslant \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta f\|}{\|f\|} \right) \tag{8}$$

Полиномиальная катастрофа

- Полиномиальная модель

$$y = \sum_{j=0}^{k} b_j x^j + \varepsilon$$

- при неудачном выборе шага и отсутствии масштабирования

Полиномиальная катастрофа

- Полиномиальная модель

$$y = \sum_{j=0}^{k} b_j x^j + \varepsilon$$

- при неудачном выборе шага и отсутствии масштабирования
- порождает матрицу нормальных уравнений с большим числом обусловленности.

Ортогональные преобразования

- Ортогональные преобразования (и только они) переводят один ортонормированный базис евклидова пространства в другой ортонормированный.
- Необходимым и достаточным условием ортогональности линейного преобразования A является равенство
$$A^* = A^{-1}, \tag{9}$$
где A^* — сопряжённое, а A^{-1} — обратное преобразования.

Ортогональные преобразования

- Ортогональные преобразования (и только они) переводят один ортонормированный базис евклидова пространства в другой ортонормированный.
- Необходимым и достаточным условием ортогональности линейного преобразования A является равенство
$$A^* = A^{-1}, \tag{9}$$
где A^* — сопряжённое, а A^{-1} — обратное преобразования.
- В ортонормированном базисе ортогональным преобразованиям (и только им) соответствуют ортогональные матрицы. Таким образом, критерием ортогональности матрицы A является равенство (9), где A^* — транспонированная, а A^{-1} — обратная матрицы.

Ортогональные преобразования -2

- В случае евклидовой плоскости всякое собственное ортогональное преобразование является поворотом на некоторый угол φ, и его матрица в любом ортонормированном базисе имеет вид

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}. \tag{10}$$

- Матрица несобственного орт.преобразования будет

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ \sin\varphi & -\cos\varphi \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Ортогональные преобразования -2

- В случае евклидовой плоскости всякое собственное ортогональное преобразование является поворотом на некоторый угол φ, и его матрица в любом ортонормированном базисе имеет вид

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}. \tag{10}$$

- Матрица несобственного орт.преобразования будет

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ \sin\varphi & -\cos\varphi \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Она симметрична, с собственными числами 1 и -1. В подходящем базисе эта матрица примет вид

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

то есть будет отражением относительно некоторой прямой.

- Собственное ортогональное преобразование есть произведение двух отражений:

$$\begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ \sin\varphi & -\cos\varphi \end{pmatrix}.$$

QR-разложение

Был разработан в конце 1950-х годов независимо В. Н. Кублановской и Дж. Фрэнсисом.

- Пусть A — вещественная матрица, для которой мы хотим найти собственные числа и векторы. Положим $A_0 = A$.
- На k-ом шаге (начиная с $k = 0$) вычислим QR-разложение $A_k = Q_k R_k$, где Q_k — ортогональная матрица (то есть $Q_k^T = Q_k^{-1}$), а R_k — верхняя треугольная матрица. Затем мы определяем $A_{k+1} = R_k Q_k$.
- Заметим, что

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k,$$

то есть все матрицы A_k являются подобными, то есть их собственные значения равны.

QR-разложение

Был разработан в конце 1950-х годов независимо В. Н. Кублановской и Дж. Фрэнсисом.

- Пусть A — вещественная матрица, для которой мы хотим найти собственные числа и векторы. Положим $A_0 = A$.
- На k-ом шаге (начиная с $k = 0$) вычислим QR-разложение $A_k = Q_k R_k$, где Q_k — ортогональная матрица (то есть $Q_k^T = Q_k^{-1}$), а R_k — верхняя треугольная матрица. Затем мы определяем $A_{k+1} = R_k Q_k$.
- Заметим, что

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k,$$

  то есть все матрицы A_k являются подобными, то есть их собственные значения равны.
- Пусть все диагональные миноры матрицы A не вырождены. Тогда последовательность матриц A_k при $k \to \infty$ сходится по форме к клеточному правому треугольному виду, соответствующему клеткам с одинаковыми по модулю собственными значениями.

QR-разложение

Был разработан в конце 1950-х годов независимо В. Н. Кублановской и Дж. Фрэнсисом.

- Пусть A — вещественная матрица, для которой мы хотим найти собственные числа и векторы. Положим $A_0 = A$.
- На k-ом шаге (начиная с $k = 0$) вычислим QR-разложение $A_k = Q_k R_k$, где Q_k — ортогональная матрица (то есть $Q_k^T = Q_k^{-1}$), а R_k — верхняя треугольная матрица. Затем мы определяем $A_{k+1} = R_k Q_k$.
- Заметим, что

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k,$$

  то есть все матрицы A_k являются подобными, то есть их собственные значения равны.
- Пусть все диагональные миноры матрицы A не вырождены. Тогда последовательность матриц A_k при $k \to \infty$ сходится по форме к клеточному правому треугольному виду, соответствующему клеткам с одинаковыми по модулю собственными значениями.
- Сам процесс QR-разложения м.б. реализован при помощи модифицированного алгоритма Грама – Шмидта, отражений Хаусхолдера или вращений Гивенса

Singular Values Decomposition

Сингулярное разложение матрицы A позволяет вычислять сингулярные числа данной матрицы, а также левые и правые сингулярные векторы матрицы A:

- левые сингулярные векторы матрицы A — это собственные векторы матрицы AA^*;
- правые сингулярные векторы матрицы A — это собственные векторы матрицы A^*A.

Singular Values Decomposition

Сингулярное разложение матрицы A позволяет вычислять сингулярные числа данной матрицы, а также левые и правые сингулярные векторы матрицы A:

- левые сингулярные векторы матрицы A — это собственные векторы матрицы AA^*;
- правые сингулярные векторы матрицы A — это собственные векторы матрицы A^*A.

Сингулярные числа матрицы не следует путать с собственными числами той же матрицы.

Singular Values Decomposition

Сингулярное разложение матрицы A позволяет вычислять сингулярные числа данной матрицы, а также левые и правые сингулярные векторы матрицы A:

- левые сингулярные векторы матрицы A — это собственные векторы матрицы AA^*;
- правые сингулярные векторы матрицы A — это собственные векторы матрицы A^*A.

Сингулярные числа матрицы не следует путать с собственными числами той же матрицы.

«*» — эрмитово сопряжение.

Всякую матрицу можно представить в виде разложения:

$$A = U\Sigma V^* \tag{12}$$

где $U_{M\times M}$ и $V_{N\times N}$ — унитарные матрицы, состоящие из левых и правых сингулярных векторов, а $\Sigma_{M\times N}$ — «диагональная» матрица сингулярных чисел.

Псевдообратные матрицы

- Сингулярное разложение любой матрицы — процесс технический, используемые методы: QR-разложение, уже упомянутые отражения Хаусхолдера или вращения Гивенса. Алгоритм реализован во многих общедоступных библиотеках.

Псевдообратные матрицы

- Сингулярное разложение любой матрицы — процесс технический, используемые методы: QR-разложение, уже упомянутые отражения Хаусхолдера или вращения Гивенса. Алгоритм реализован во многих общедоступных библиотеках.
- Сингулярное разложение может быть использовано для нахождения псевдообратных матриц, которые и применяются, в частности, в МНК.
- Если $A = U\Sigma V^*$, то псевдообратная к ней матрица находится по формуле:

$$A^+ = V\Sigma^+ U^* \tag{13}$$

где Σ^+ — псевдообратная к матрице Σ,

- получающаяся из неё заменой каждого ненулевого элемента σ на диагонали на обратный к нему: σ^{-1}, с последующим транспонированием самой матрицы.

Сингулярный анализ

- Иногда требуется приближать заданную матрицу A некоторой другой матрицей A_k с заранее заданным рангом k.

Сингулярный анализ

- Иногда требуется приближать заданную матрицу A некоторой другой матрицей A_k с заранее заданным рангом k.
- Если потребовать, чтобы такое приближение было наилучшим в том смысле, что Фробениусова (Евклидова) норма разности матриц A и A_k минимальна, при ограничении $\mathrm{rank}(A_k) = k$, то оказывается, что наилучшая такая матрица A_k получается из сингулярного разложения матрицы A по формуле:

$$M_k = U\Sigma_k V^*,$$

где Σ_k — матрица Σ, в которой заменили нулями все диагональные элементы, кроме k наибольших элементов.

Сингулярный анализ

- Иногда требуется приближать заданную матрицу A некоторой другой матрицей A_k с заранее заданным рангом k.
- Если потребовать, чтобы такое приближение было наилучшим в том смысле, что Фробениусова (Евклидова) норма разности матриц A и A_k минимальна, при ограничении $\operatorname{rank}(A_k) = k$, то оказывается, что наилучшая такая матрица A_k получается из сингулярного разложения матрицы A по формуле:
$$M_k = U \Sigma_k V^*,$$
где Σ_k — матрица Σ, в которой заменили нулями все диагональные элементы, кроме k наибольших элементов.
- **Главный вопрос для исследователя — критерий малости.** Необходимо представление о погрешностях данных.

Решение задач МНК с использованием сингулярного разложения

- Исходная задача МНК:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{14}$$

где A — $m \times n$ вещественная матрица, $\mathbf{x}$ — вектор-столбец длины n, $\mathbf{b}$ — вектор длины m

Решение задач МНК с использованием сингулярного разложения

- Исходная задача МНК:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{14}$$

где A — $m \times n$ вещественная матрица, $\mathbf{x}$ — вектор-столбец длины n, $\mathbf{b}$ — вектор длины m

- получим сингулярное разложение $A = U\Sigma V^T$

Решение задач МНК с использованием сингулярного разложения

- Исходная задача МНК:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{14}$$

где A — $m \times n$ вещественная матрица, $\mathbf{x}$ — вектор-столбец длины n, $\mathbf{b}$ — вектор длины m

- получим сингулярное разложение $A = U\Sigma V^T$
- возьмем $A_k = U\Sigma_k V^T$ — сокращенное представление матрицы A
- построим приближенное решение переопределенной системы:

$$\hat{\mathbf{x}}_k = A_k^+ \mathbf{b} = V\Sigma_k^+ U^T \mathbf{b} \tag{15}$$

- подставив оценку решения в исходную систему, найдем сумму квадратов невязок:

$$\|A\hat{\mathbf{x}}_k - \mathbf{b}\|_2 \tag{16}$$

Решение задач МНК с использованием сингулярного разложения

- Исходная задача МНК:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{14}$$

где A — $m \times n$ вещественная матрица, $\mathbf{x}$ — вектор-столбец длины n, $\mathbf{b}$ — вектор длины m

- получим сингулярное разложение $A = U\Sigma V^T$
- возьмем $A_k = U\Sigma_k V^T$ — сокращенное представление матрицы A
- построим приближенное решение переопределенной системы:

$$\hat{\mathbf{x}}_k = A_k^+\mathbf{b} = V\Sigma_k^+U^T\mathbf{b} \tag{15}$$

- подставив оценку решения в исходную систему, найдем сумму квадратов невязок:

$$\|A\hat{\mathbf{x}}_k - \mathbf{b}\|_2 \tag{16}$$

- варьируя k, проверим чувствительность и полноту модели

math.nist.gov

Services

Guide to Available Mathematical Software
An extensive cross-index and virtual repository of mathematical and statistical software.

The Matrix Market
A repository of matrix data for comparative studies of numerical linear algebra algorithms.

NIST/SEMATECH Engineering Statistics Handbook
A Handbook to help scientists and engineers incorporate statistical methods in their work as efficiently as possible.

Statistical Reference Datasets
A repository of data sets with certified results for objective evaluation of statistical software.

JavaNumerics
A focal point for numerical computing in Java.

Organizations

Applied and Computational Mathematics Division
providing technical leadership within NIST in modern analytical and computational methods for solving scientific problems of interest to industry.
Seminars · Software

Statistical Engineering Division
catalyzing scientific and industrial research through application of statistical methods to experimentation and data analysis.

Additional Projects

ACTS	Automated Combinatorial Testing for Software
AlgoCEM	Time-Domain Algorithms for Computational Electromagnetics
DLMF	Digital Library of Mathematical Functions
f90gl	3D Graphics in Fortran 90 based on OpenGL
JazzNet	Personal Supercomputing on PC Clusters
OOF	Object-Oriented Finite element modeling of complex material microstructures
OOMMF	Object-Oriented MicroMagnetic Framework
PHAML	Parallel Adaptive Multigrid Methods and Software
QITAP	Quantum Information Theory and Practice
Reflectance	Computer graphic rendering of material surfaces
RNG	Random number generation and testing
SciVis	Scientific Visualization
spBLAS	Sparse Basic Linear Algebra Subprograms
TNT	Template Numerical Toolkit for C++

gams.nist.gov

NIST

Guide to Available Mathematical Software

A cross-index and virtual repository of mathematical and statistical software components of use in computational science and engineering.

More Math and Statistics at NIST. Do you find this service useful? Help us justify it.

Mathematical Software Cross Index

Search for software according to

- Browse the Problem Taxonomy.
- Search the Taxonomy by problem keywords.
- Browse the Package List.
- Search for modules by name or keyword.

If you cannot find what you need in the cross index, you might try some of these other sources of information about mathematical software.

Background Information

- Project summary.
- Glossary of terms.
- References, credits and disclaimers.
- Other NIST projects related to applied mathematics and statistics.

Address comments and questions to *gams@nist.gov* .

netlib.no

вместо netlib.org

Welcome to netlib, a repository of mathematical software, data, documents, address lists, and other useful items. There are several ways to search the collection.

A top level index describes the chapters of netlib, each of which has an individual index file.

Keyword searching may be most convenient if you know exactly what you're looking for.

The GAMS classification scheme provides a systematic classification but does not necessarily cover everything in netlib.

A catalog of approximation algorithms provides a more detailed taxonomy but covers a narrower scope.

netlib/crc/ has a list of files with modification times, lengths, and checksums to assist people who wish to automatically track changes. To ask to be notified of new and changed files in a library,

```
mail netlib@research.bell-labs.com
subscribe eispack
```

replacing eispack by whatever library you're interested in.

The former netlib/matlab directory is now maintained at *matlib@mathworks.com*.
The StatLib collection of statistical software is available from *statlib@temper.stat.cmu.edu*.
Another useful netlib-related site (TSPLIB, HPF, PDS,...) is *softlib.rice.edu*.
The symbolic algebra system REDUCE is supported by *reduce-netlib@rand.org*.
The TeX User Group distributes TeX-related software from *tuglib@math.utah.edu*.
The computational group theory system GAP is available by anonymous ftp in pub/gap from *samson.math.rwth-aachen.de, dimacs.rutgers.edu, math.ucla.edu, and pell.anu.edu.au*.

If you're reading this, you presumably have Mosaic or some similar WWW client talking to the ftp or http servers on netlib.bell-labs.com, in Murray Hill NJ, USA or www.netlib.no in Bergen, Norway. If not, you may prefer to use email...

netlib.no

часть списка библиотек линейной алгебры и LSS

- *contact:* lapack@cs.utk.edu
- *lib:* lapack++ (index) (tar)
  - *for:* the c++ version of lapack (see www.netlib.org/lapack/)
  - *rel:* excellent
  - *age:* research
  - *ref:* LAPACK Users' Guide, May 1992, available from SIAM; , 3600 University City Science Center; , Philadelphia, PA 19104-2688; 215-382-9800, FAX 215-386-7999; , service@siam.org
  - *master:* ornl.gov
  - *contact:* lapack@cs.utk.edu
- *lib:* lapack90 (index) (tar)
  - *for:* Fortran90 interface for LAPACK
  - *by:* J. J. Dongarra, J. Du Croz, S. Hammarling, J. Wasniewski, , A. Zemla
  - *age:* experimental
  - *ref:* LAPACK Working Note 101: A Proposal for a Fortran 90 Interface , for LAPACK (http://www.netlib.org/lapack/lawns/lawn101.ps)
  - *master:* ornl.gov
  - *contact:* lapack@cs.utk.edu
- *lib:* laso (index) (tar)
  - *for:* a few eigenvalues/eigenvectors of a large (sparse) symmetric matrix
  - *alg:* Lanczos
  - *by:* David Scott
  - *master:* ornl.gov
  - *see:* go/underwood.f
- *lib:* lawson-hanson (index) (tar)
  - *for:* least squares
  - *by:* C. Lawson and R. Hanson
  - *ref:* "Solving Least Squares Problems," SIAM Publications
  - *lang:* Fortran77, Fortran90
  - *master:* netlib.bell-labs.com
- *lib:* linalg (index) (tar)

Алгоритмы МНК в разных пакетах обработки

astromatic.net

SCAMP строит матрицу **нормальных уравнений**, используя веса отдельных измерений и отбраковывая выбросы

Алгоритмы МНК в разных пакетах обработки

astromatic.net — SCAMP строит матрицу **нормальных уравнений**, используя веса отдельных измерений и отбраковывая выбросы

astrometry.net — в алгоритме solve_plate используется вызов SCAMP

Алгоритмы МНК в разных пакетах обработки

astromatic.net	SCAMP строит матрицу **нормальных уравнений**, используя веса отдельных измерений и отбраковывая выбросы
astrometry.net	в алгоритме solve_plate используется вызов SCAMP
MIDAS	нелинейная минимизация χ^2 модифицированным методом Гаусса-Ньютона

Литература

- Дж. Форсайт, М. Малкольм, К. Моулер, *Машинные методы математических вычислений*, М. “Мир”, 1980, 280 с.
- В.В. Воеводин, Ю.А. Кузнецов, *Матрицы и вычисления*, М. “Наука”, 1984, 320 с.
- Ч. Лоусон, Р. Хенсон, *Численное решение задач метода наименьших квадратов*/Пер. с англ., М. “Наука”, 1986, 232 с.

Задания к семинару

Классическая задача экстраполяции и выравнивания демографических данных.

Таблица 1: Данные бюро переписей США

t, год	y, население
1900	75994574
1910	91972265
1920	105710619
1930	123202999
1940	131669274
1950	150697360
1960	179323174
1970	203211927

Приблизить данные квадратичной моделью $y(t) \approx c_1 + c_2 t + c_3 t^2$ и найти значение $y(1980)$.

Задания к семинару-2

- Решить методом Гаусса с одинарной и двойной точностью.
- Найти сингулярные числа матрицы плана.
- Повторить предыдущие два задания, отмасштабировав аргумент: $t \mapsto t - 1900$.

спасибо за внимание