DE CONDITIE VAN EEN BEPAALD TYPE MATRIX

M.L. Potters.

Rapport R 179,a.

van de

Rekenafdeling van het Mathematisch Centrum, Amsterdam-O.

1 9 5 2 .

DE CONDITIE VAN EEN BEPAALD TYPE MATRIX

1. Voor het oplossen van de p stelsels van n+1 lineaire vergelijkingen met n+1 onbekenden

$$\sum_{j=0}^{n} a_{ij}\, x_j^{(k)} = c_i^{(k)} \qquad \begin{pmatrix} i = 0 \ldots n \\ k = 1 \ldots p \end{pmatrix} \qquad (1)$$

biedt de methode met de matrix-inversie vooral voordelen als $p > 1$, omdat na een inversie alle p stelsels gemakkelijk opgelost kunnen worden.

In matrix-notatie is n.l. (1) als volgt te schrijven:

$$A\,.x^{(k)} = c^{(k)} \qquad (k = 1 \ldots p) \qquad (2)$$

waarin

A de quadratische matrix der coefficienten a_{ij}

$c^{(k)}$ de (kolom)matrix der coefficienten $c_i^{(k)}$

$x^{(k)}$ de (kolom)matrix der onbekenden.

De oplossing van (2) luidt

$$x^{(k)} = A^{-1}\ c^{(k)} \qquad (k = 1 \ldots p) \qquad (3)$$

A^{-1} is de inverse van A, m.a.w. $A.A^{-1} = I_{n+1}$ = de eenheidsmatrix van orde n+1.

Voor elk der stelsels nu is A^{-1} dezelfde matrix. Hebben we de inversie van A eenmaal uitgevoerd (b.v. volgens Fox[1]), dan verkrijgen we door een eenvoudige berekening volgens (3) direct de p stellen oplossingen.

2. Een dergelijk geval doet zich voor, wanneer p verzamelingen van waarnemingsgegevens gestrookt moeten worden, als deze althans steeds voor dezelfde waarden van het argument gegeven zijn en door functies van dezelfde graad voorgesteld zullen worden. De gegevens zijn dus

$$u^{(k)}\,(z_m) \text{ voor } m = 1 \ldots q \qquad (k = 1 \ldots p)$$

z_m kan een aantal variabelen voorstellen; om de gedachten te bepalen beschouwen we functies van een variabele.

De grootheden $u^{(k)}$ worden in het beschouwde interval benaderd door de polynomen

$$P^{(k)}(z) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^{(k)}\, z^j \qquad (k = 1 \ldots p)$$

die dus alle p van dezelfde graad in de variabele n zijn, in dit geval van de n^e graad in z. Elk polynoom bevat n+1 coefficienten $\alpha_j^{(k)}$, welke met behulp van de methode der kleinste kwadraten bepaald worden.

Deze levert de zg. normaalvergelijkingen

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i^{(k)}} \sum_{m=1}^{q} \left\{ u^{(k)}(z_m) - \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^{(k)} z_m^j \right\}^2 = 0 \quad \begin{matrix}(i= 0\ldots n)\\(k= 1\ldots p)\end{matrix}$$

ofwel na uitwerking

$$\sum_{j=0}^{n} \left\{ \alpha_j^{(k)} \sum_{m=1}^{q} z_m^{i+j} \right\} = \sum_{m=1}^{q} z_m^i \, u^{(k)}(z_m) \quad \begin{matrix}(i =0\ldots n)\\(k =1\ldots p)\end{matrix} \qquad (4)$$

De stelsels (1) en (4) zijn dezelfde, als men schrijft

$$x_j^{(k)} = \alpha_j^{(k)}$$

$$a_{ij} = \sum_{m=1}^{q} z_m^{i+j}$$

$$c_i^{(k)} = \sum_{m=1}^{q} z_m^i \, u^{(k)}(z_m)$$

De elementen van de matrix A zijn dus over m gesommeerde machten van z_m; i+j loopt van 0 (links boven) tot en met 2n (rechts onder). Hierdoor is het mogelijk, dat de grootte-orde der elementen naar rechts en naar beneden sterk toe- of afneemt.

3. Men kan zich afvragen met welke nauwkeurigheid een inversie als in 1. uitgevoerd kan worden. Om dit te kunnen beschrijven, is door Turing [2)] het begrip "conditie van de matrix" ingevoerd en wel in die zin, dat de conditie slecht is als bij de bewerking veel van de uitgangsprecisie verloren gaat.

Als "maat" voor de conditie kan dienen het "conditiegetal" N en wel is voor de matrix A:

$$N_A = \frac{1}{n} N(A).N(A^{-1})$$

waarin n = orde van de matrix

$$N(A) = \text{norm van } A = \Big(\sum_{i,j} a_{ij}^2 \Big)^{\frac{1}{2}}.$$

Natuurlijk is $N_A = N_{A^{-1}}$.

De betekenis van N_A blijkt uit het volgende:

Men heeft op te lossen:

$$A.x_o = c$$

doch gebruikt i.p.v. de exacte matrix A de benadering A+S. (S is dus b.v. de matrix der afrondingsfouten). In feite lost men dus op

$$(A+S)x = c \;.$$

In eerste benadering geldt dan voor de fouten in de oplossing:

$$x_o - x = A^{-1} \cdot S \cdot x_o .$$

Neemt men het gemiddelde over de elementen van A en van x_o en over alle mogelijke matrices S, dan vindt men

$$\frac{\text{gemiddelde fout in element van } x_o}{\text{gemiddelde element van } x_o} =$$

$$= N_A \cdot \frac{\text{gemiddelde fout in element van A}}{\text{gemiddelde element van A}} . \qquad (5)$$

(Met gemiddelde is bedoeld de wortel uit het gemiddelde kwadraat). N_A is dus zo ongeveer het veelvoud, waarmee de relatieve fouten, die in het begin van het inversieproces aanwezig waren, aan het eind weer te voorschijn komen.

Een orthogonale matrix heeft de beste conditie, n.l. N = 1, terwijl voor een singuliere matrix $N = \infty$ Voor een "willekeurige" matrix van orde n is $N = \sqrt{n}$.

4. Voor matrices van tweede orde kan N gemakkelijk berekend worden. (Wegens zijn statistische definitie is N vooral van belang voor matrices van hogere orde).

Voor $B = \begin{Vmatrix} a & b \\ b & c \end{Vmatrix}$ is n.l.

$$N_B = \frac{a^2+2b^2+c^2}{2|b^2-ac|} .$$

Is B singulier, dus $\text{Det}(B) = b^2-ac = 0$, dan is inderdaad $N_B = \infty$ Voor orthogonale B daarentegen (a+c=0) is $N_B = 1$.

Beschouwen we hiernaast de matrix

$$B^* = M \cdot B \cdot M$$

waarin $M = \begin{Vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & g \end{Vmatrix}$ zodat $B^* = \begin{Vmatrix} a & bg \\ bg & cg^2 \end{Vmatrix}$

dan is

$$N_{B^*} = \frac{a^2g^{-2}+2b^2+c^2g^2}{2|b^2-ac|}$$

Veronderstel nu a, b en c van grootte-orde 1 en $g \gg 1$ dan is

$$\frac{N_{B^*}}{N_B} = \frac{a^2g^{-2}+2b^2+c^2g^2}{a^2+2b^2+c^2} = 0(g^2) \qquad (6)$$

B^* heeft dus een veel slechtere conditie dan B. Krijgt men een matrix als B^* te inverteren, dan verdient het aanbeveling, eerst de transformatie

$$B = M^{-1} B^* M^{-1} \tag{7}$$

uit te voeren en dan B i.p.v. B^* te inverteren. $(B^*)^{-1}$ volgt dan uit

$$(B^*)^{-1} = M^{-1} B^{-1} M^{-1}.$$

De matrix A uit 2. en de matrix B^* zijn nu van hetzelfde type. Bovenstaande beschouwingen kunnen uitgebreid worden tot hogere-orde matrices met hetzelfde resultaat, nl. dat matrices van dit type in een betere conditie komen, wanneer door een eenvoudige transformatie als b.v. het weglaten van machten van 10, de elementen van gelijke grootte-orde worden.

5. Ter illustratie van het voorgaande kan het volgende geval uit de practijk der Rekenafdeling dienen.

In de notatie van 2. was p = 1, n = 4, q = 55. z staat nu voor 2 variabelen, zodat de orde van de matrix A nu niet n+1 = 5 is, maar $\frac{1}{2}(n+1)(n+2) = 15$. De onbekende coëfficienten β_{rs} vormen de kolommatrix x.

De conditie was zo slecht, dat in de elementen van x alle significante cijfers wegvielen, m.a.w. de nauwkeurigheidsmarge was groter dan de β_{rs}'s zelf, hoewel de elementen van A in 8 cijfers gegeven waren.

Om de precisie op te voeren, werd een transformatie als (7) uitgevoerd, d.w.z. in plaats van

$$A.\ x = c$$

werd opgelost $A^*.(M^{-1}.x) = M.c = c^*$

waarvan de oplossing is

$$x = M.(A^*)^{-1}.c^*$$

De diagonaalmatrix M bevatte machten van 10.

Het verkregen resultaat was nu inderdaad zinvol, hoewel nog pover, vergeleken bij de uitgangsnauwkeurigheid.

De conditie bleek nog iets te verbeteren door A^* zodanig tot A^{**} te transformeren, dat de elementen op de hoofddiagonaal gelijk werden

De conditiegetallen waren in deze 3 gevallen:

Matrix	N
A	2.10^{15}
A^*	2.10^{7}
A^{**}	3.10^{6}

Referenties: 1) Fox L., 1950, J.R.Stat.Soc., Ser.B, 12, 120.
2) Turing,A.M., 1948,Quart.J.Mech.Appl.Math.,1, 287.

De matrices A, A^{-1} en c resp. A^*, $(A^*)^{-1}$, c^* en x volgen hierond

A

1	2	3	4
5,5.10^{1}	9,75 .10^{2}	9,0947134.10^{2}	1,8925 .10^{4}
	1,8925.10^{4}	1,5549715.10^{4}	3,88875 .10^{5}
		1,9464302.10^{4}	2,9666928.10^{5}
			8,299165 .10^{6}

A^{-1}

1	2	3	4
1,645829.10^{3}			
-3,680318.10^{2}	8,981053.10^{1}		
-4,144521.10^{1}	3,913439	5,1031154	
2,841637.10^{1}	-7,214540	-1,193176 .10^{-1}	5,926308 .10^{-1}
1,0769268.10^{1}	-2,314237	-3,341254 .10^{-1}	1,715324 .10^{-1}
-2,138951	8,493362.10^{-1}	-2,375879 .10^{-1}	-7,639927 .10^{-2}
-9,577838.10^{-1}	2,489671.10^{-1}	4,454455 .10^{-4}	-2,078998 .10^{-2}
-5,263253.10^{-1}	1,254314.10^{-1}	7,374579 .10^{-3}	-9,774381 .10^{-3}
-6,915704.10^{-2}	5,404628.10^{-3}	9,219076 .10^{-3}	-1,9690852.10^{-5}
1,043362.10^{-1}	-3,273100.10^{-2}	4,971001 .10^{-3}	2,767966 .10^{-3}
1,205038.10^{-2}	-3,18257 .10^{-3}	2,05291 .10^{-5}	2,69276 .10^{-4}
7,75369 .10^{-3}	-1,93181 .10^{-3}	-5,1000 .10^{-5}	1,54005 .10^{-4}
2,70442 .10^{-3}	-5,67936 .10^{-4}	-9,2054 .10^{-5}	4,0704 .10^{-5}
-5,9555 .10^{-4}	2,6649 .10^{-4}	-8,6849 .10^{-5}	-2,4991 .10^{-5}
-1,1964 .10^{-3}	3,5104 .10^{-4}	-3,9120 .10^{-5}	-2,9005 .10^{-5}

5	6	7	8
$1,5549715 \cdot 10^{4}$	$1,9464302 \cdot 10^{4}$	$3,88875 \cdot 10^{5}$	$2,9666928 \cdot 10^{5}$
$2,9666928 \cdot 10^{5}$	$3,2443908 \cdot 10^{5}$	$8,299165 \cdot 10^{6}$	$6,0445013 \cdot 10^{6}$
$3,2443908 \cdot 10^{5}$	$4,9598313 \cdot 10^{5}$	$6,0445013 \cdot 10^{6}$	$6,1319162 \cdot 10^{6}$
$5,0445013 \cdot 10^{6}$	$6,1319162 \cdot 10^{6}$	$1,8191288 \cdot 10^{8}$	$1,2844629 \cdot 10^{8}$
$5,1319162 \cdot 10^{6}$	$8,0999007 \cdot 10^{6}$	$1,2844629 \cdot 10^{8}$	$1,2460381 \cdot 10^{8}$
	$1,4163077 \cdot 10^{7}$	$1,2460381 \cdot 10^{8}$	$1,5209070 \cdot 10^{8}$
		$4,0671345 \cdot 10^{9}$	$2,8097701 \cdot 10^{9}$
			$2,6486149 \cdot 10^{9}$

5	6	7	8
$7,743685 \cdot 10^{-2}$			
$-1,204232 \cdot 10^{-2}$	$2,511261 \cdot 10^{-2}$		
$-5,559811 \cdot 10^{-3}$	$2,745346 \cdot 10^{-3}$	$7,3979513 \cdot 10^{-4}$	
$-3,629457 \cdot 10^{-3}$	$1,203994 \cdot 10^{-3}$	$3,259637 \cdot 10^{-4}$	$1,9392603 \cdot 10^{-4}$
$-6,605420 \cdot 10^{-4}$	$-3,987713 \cdot 10^{-4}$	$-7,134596 \cdot 10^{-6}$	$1,261920 \cdot 10^{-5}$
$6,80764 \cdot 10^{-4}$	$-7,493537 \cdot 10^{-4}$	$-9,662027 \cdot 10^{-5}$	$-4,793289 \cdot 10^{-5}$
$6,74766 \cdot 10^{-5}$	$-3,56276 \cdot 10^{-5}$	$-9,70491 \cdot 10^{-6}$	$-4,02226 \cdot 10^{-6}$
$5,18835 \cdot 10^{-5}$	$-2,14001 \cdot 10^{-5}$	$-5,2029 \cdot 10^{-6}$	$-2,9592 \cdot 10^{-6}$
$2,09616 \cdot 10^{-5}$	$-3,01837 \cdot 10^{-6}$	$-1,27863 \cdot 10^{-6}$	$-9,46405 \cdot 10^{-7}$
$-2,3336 \cdot 10^{-6}$	$7,9900 \cdot 10^{-6}$	$9,1216 \cdot 10^{-7}$	$3,7686 \cdot 10^{-7}$
$-8,1756 \cdot 10^{-6}$	$7,4145 \cdot 10^{-6}$	$1,00161 \cdot 10^{-6}$	$5,1792 \cdot 10^{-7}$

9	10	11	12
$3,2443908.10^{5}$	$4,9598313.10^{5}$	$8,299165\ .10^{6}$	$6,0445013.10^{6}$
$6,1319162.10^{6}$	$8,0999007.10^{6}$	$1,8191288.10^{8}$	$1,2844629.10^{8}$
$8,0999007.10^{6}$	$1,4163077.10^{7}$	$1,2844629.10^{8}$	$1,2460381.10^{8}$
$1,2460381.10^{8}$	$1,5209070.10^{8}$	$4,0671345.10^{9}$	$2,8097701.10^{9}$
$1,5209070.10^{8}$	$2,2727535.10^{8}$	$2,8097701.10^{9}$	$2,6486149.10^{9}$
$2,2727535.10^{8}$	$4,3587212.10^{8}$	$2,6486149.10^{9}$	$3,0888004.10^{9}$
$2,6486149.10^{9}$	$3,0888004.10^{9}$	$9,2326750.10^{10}$	$6,2778783.10^{10}$
$3,0888004.10^{9}$	$4,2447924.10^{9}$	$6,2778783.10^{10}$	$5,8042110.10^{10}$
$4,2447924.10^{9}$	$6,8918720.10^{9}$	$5,8042110.10^{10}$	$6,5790596.10^{10}$
	$1,4097614.10^{10}$	$6,5790596.10^{10}$	$8,6225078.10^{10}$
		$2,1213304.10^{12}$	$1,4254941.10^{12}$
			$1,3003007.10^{12}$

9	10	11	12
$2,0538349.10^{-5}$			
$6,66875\ .10^{-6}$	$2,4423024.10^{-5}$		
$1,50053\ .10^{-7}$	$1,23332\ .10^{-6}$	$1,28895.10^{-7}$	
$-4,3241\ .10^{-8}$	$7,8802\ .10^{-7}$	$6,4550\ .10^{-8}$	$4,7169.10^{-8}$
$-2,09443\ .10^{-7}$	$1,81125\ .10^{-7}$	$1,5227\ .10^{-8}$	$1,2477.10^{-8}$
$-2,0017\ .10^{-7}$	$-2,1085\ .10^{-7}$	$1,1934\ .10^{-8}$	$-7,0165.10^{-9}$
$-3,2709\ .10^{-8}$	$-2,55286\ .10^{-7}$	$1,2707\ .10^{-8}$	$-8,2940.10^{-9}$

13	14	15	C
$6,1319162.10^{6}$	$8,0999007.10^{6}$	$1,4163077.10^{7}$	$1,395 \quad .10^{2}$
$1,2460381.10^{8}$	$1,5209070.10^{8}$	$2,2727535.10^{8}$	$2,7274000.10^{3}$
$1,5209070.10^{8}$	$2,2727535.10^{8}$	$4,3587212.10^{8}$	$2,2221231.10^{3}$
$2,6486149.10^{9}$	$3,0888004.10^{9}$	$4,2447924.10^{9}$	$5,6326400.10^{4}$
$3,0888004.10^{9}$	$4,2447924.10^{9}$	$6,8918720.10^{9}$	$4,2740528.10^{4}$
$4,2447924.10^{9}$	$6,8918720.10^{9}$	$1,4097614.10^{10}$	$4,6355409.10^{4}$
$5,8042110.10^{10}$	$6,5790596.10^{10}$	$8,6225078.10^{10}$	$1,2064054.10^{6}$
$6,5790596.10^{10}$	$8,6225078.10^{10}$	$1,2815677.10^{11}$	$8,7568522.10^{5}$
$8,6225078.10^{10}$	$1,2815677.10^{11}$	$2,2024816.10^{11}$	$8,8378636.10^{5}$
$1,2815677.10^{11}$	$2,2024816.10^{11}$	$4,7138078.10^{11}$	$1,1573110.10^{6}$
$1,3003007.10^{12}$	$1,4466016.10^{12}$	$1,8415400.10^{12}$	$2,6513293.10^{7}$
$1,4466016.10^{12}$	$1,8415400.10^{12}$	$2,6048692.10^{12}$	$1,8680972.10^{7}$
$1,8415400.10^{12}$	$2,6048692.10^{12}$	$4,0814945.10^{12}$	$1,8066079.10^{7}$
	$4,0814945.10^{12}$	$7,2950809.10^{12}$	$2,1931954.10^{7}$
		$1,6118684.10^{13}$	$3,2471069.10^{7}$

13	14	15
$6,7553.10^{-9}$		
$-6,4533.10^{-10}$	$3,5598.10^{-9}$	
$-2,1659.10^{-9}$	$1,7803.10^{-9}$	$2,7802.10^{-9}$

$\underline{A^*}$

	1	2	3	4
	5,500000	9,750000	9,094713	1,892500
		18,925000	15,549715	3,888750
			19,464302	2,966693
				0,829916

$\underline{A^{*-1}}$

1	2	3	4
49,0324			
6702,3956	-24037,7469		
- 4828,4324	4577,2090	5957,5732	
-78801,5759	224260,4322	-14179,0269	-1921369,4290
10759,6995	27108,2576	-38907,3030	- 441374,7142
32571,5419	-49607,6904	-27920,9010	331793,5482
32536,7413	-84652,9151	751,5449	688759,2502
5873,0718	-28042,7816	8678,6922	296271,1044
- 9378,6935	9937,3329	10683,8560	- 34737,9911
- 8103,0780	14101,3109	5916,0146	- 106268,8277
- 4641,5402	11521,9064	227,7282	- 90363,2888
- 1647,8569	5213,6125	- 614,1399	- 49299,3062
439,1179	388,0687	- 1073,8921	- 9880,2324
1198,0873	- 1816,6213	- 1003,1204	11606,8684
7096,3273	-13220,8638	- 4742,2074	105521,5630

5	6	7	8
1,554972	1,946430	3,888750	2,966693
2,966693	3,244391	8,299165	6,044501
3,244391	4,959831	6,044501	6,131916
0,604450	0,613192	1,819129	1,284463
0,613192	0,809990	1,284463	1,246038
	1,416308	1,246038	1,520907
		4,067135	2,809770
			2,648615

5	6	7	8
198896,1262			
211520,6983	118913,9701		
205484,2417	-107529,9787	-236529,1429	
- 13263,8844	- 64847,3216	-122684,8337	-14147,9327
- 82310,9137	- 43599,0390	3666,3220	19022,7101
- 45471,1135	- 25838,4379	37200,4307	16456,5619
- 31436,6445	13617,3985	29853,6626	17982,0634
- 4367,4854	7544,3489	19547,5789	3661,6192
7421,1223	4986,4652	5046,3378	- 1203,4562
8605,0761	3613,7854	- 3670,7455	- 2357,6424
35037,1306	22496,0320	- 38042,8368	-14707,9773

9	10	11	12
3,244391	4,959831	8,299165	6,044501
6,131916	8,099901	18,191288	12,844629
8,099901	14,163077	12,844629	12,460381
1,246038	1,520907	4,067134	2,809770
1,520907	2,272754	2,809770	2,648615
2,272754	4,358721	2,648615	3,088800
2,648615	3,088800	9,232675	6,277878
3,088800	4,244792	6,277878	5,804211
4,244792	6,891872	5,804211	6,579060
	14,097614	6,579060	8,622508
		21,213304	14,254941
			13,003007

9	10	11	12
22807,2654			
7139,7667	6539,9325		
147,3438	-4932,5561	-3611,4494	
- 1293,1769	-2234,7525	-2829,4436	- 587,4395
- 2497,6822	- 921,2670	- 789,8705	- 81,2935
- 2103,5514	- 490,5816	459,0427	257,8779
- 3551,0002	-6800,4226	5122,4013	2164,2236

13	14	15
6,131916	8,099901	1,416308
12,460381	15,209070	2,272754
15,209070	22,727535	4,358721
2,648615	3,088800	0,424479
3,088800	4,244792	0,689187
4,244792	6,891872	1,409761
5,804211	6,579060	0,862251
6,579060	8,622508	1,281568
8,622508	12,815677	2,202482
12,815677	22,024816	4,713808
13,003007	14,466016	1,841540
14,466016	18,415400	2,604869
18,415400	26,048692	4,081494
	40,814945	7,295081
		1,611868

X	
β_{00}	- 0,0586
$10\ \beta_{10}$	1,3427
$10\ \beta_{01}$	0,1509
$10^3\ \beta_{20}$	0,253
$10^3\ \beta_{11}$	- 2,714
$10^3\ \beta_{02}$	- 0,268
$10^4\ \beta_{30}$	0,285
$10^4\ \beta_{21}$	1,681
$10^4\ \beta_{12}$	0,0892
$10^4\ \beta_{03}$	0,0832
$10^5\ \beta_{40}$	- 0,0518
$10^5\ \beta_{31}$	- 0,335
$10^5\ \beta_{22}$	- 0,0196
$10^5\ \beta_{13}$	0,0043
$10^6\ \beta_{04}$	- 0,129

c^*
13,950000
27,274000
22,221231
5,632640
4,274053
4,635541
12,064054
8,756852
8,837864
11,573110
26,513293
18,680972
18,066079
21,931954
3,247107

354,4730		
197,0624	209,4772	
647,3355	83,6418	8202,3062