

Preventing Distinguished Disaster, a case study.

Henk Koppelaar, PSM-groep
St.Jacobsstraat 14
3511 BS Utrecht.

Inleiding

Dit artikel verschaft enige numeriek-wiskundige achtergrond bij factor analyse. Deze zaken zijn veelal heel wat moeilijker dan de wiskunde voor de factor analyse zelf en worden (daarom?) in de boeken stiefmoederlijk bedeed. Er komt de eigenvector bepaling volgens Jacobi aan de orde. Deze is de beste voor dit probleem hetgeen blijkt uit vergelijkende studies (hier niet gerapporteerd) van a-priori schattingen. De methode is incourant geworden omdat hij duur in rekentijd is. Vervolgens worden a-priori foutschattingen aan eigenwaarden besproken. Het is immers altijd nog de eerste vraag of een algoritme doet wat het moet doen; de tweede vraag is "hoe goed" of "hoe nauwkeurig" hij het doet. De a-priori schattingen leveren van te voren een antwoord op deze tweede vraag.

Men dient dit artikel op te vatten als een gevolg van een oproep van Daniël E. Bailey aan de Sociale Wetenschappen, om hun verantwoordelijkheid te kennen bij het toepassen van de computer op data. In het tweede deel van dit artikel laat ik zien, dat je a-priori kunt zien hoe goed het algoritme is dat in het eerste deel gepresenteerd is.

Jacobi

Van een reële symmetrische matrix $A=(A_{ij})$ moeten eigenwaarden en eigenvectoren bepaald worden. Bij iedere reële symmetrische matrix is een reële orthogonale matrix O te vinden, zodat $D=O^{-1}AO$ diagonaalgedaante heeft. Deze matrix D heeft op de diagonaal juist de eigenwaarden van A .

De door Jacobi ¹⁾ aangegeven methode beoogt O successief op te bouwen als produkt van rotaties in geschikte vlakken. Vanwege deze meetkundige interpretatie noemt men deze methode ook wel hoofdastransformatie.

Theorie Zij A een $n \times n$ -matrix. Het bepalen van de eigenwaarden van A betreft de oplossingen van de vergelijking

$$\det(A - \lambda I) = 0. \quad \dots(1)$$

In het eenvoudigste geval, $n=2$, vinden we (A reëel en symmetrisch)

$$\lambda = \frac{1}{2}(A_{11} + A_{22}) \pm \frac{1}{2} \sqrt{A_{12}^2 + (A_{11} - A_{22})^2}. \quad \dots(2)$$

$$\text{Hier is } O = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \text{ zodat } AO = \begin{pmatrix} \lambda_1 \cos \theta & \lambda_2 \sin \theta \\ -\lambda_1 \sin \theta & \lambda_2 \cos \theta \end{pmatrix}. \quad \dots(3)$$

Uit (2) en (3) vinden we vier vergelijkingen:

$$\tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{A_{11} - \lambda}{A_{12}} = \frac{\frac{1}{2}(A_{11} - A_{22}) - \frac{1}{2} \sqrt{A_{12}^2 + \frac{1}{4}(A_{11} - A_{22})^2}}{A_{12}} \quad \dots(4)$$

$$= \frac{\lambda_2 - A_{11}}{A_{12}} = \frac{-\frac{1}{2}(A_{11} - A_{22}) - \frac{1}{2} \sqrt{A_{12}^2 + \frac{1}{4}(A_{11} - A_{22})^2}}{A_{12}} \quad \dots(5)$$

$$= \frac{A_{12}}{A_{22} - \lambda} = \frac{-A_{12} \operatorname{sign}(A_{11} - A_{22})}{\frac{1}{2}(A_{11} - A_{22}) + \frac{1}{2} \sqrt{A_{12}^2 + \frac{1}{4}(A_{11} - A_{22})^2}} \quad \dots(6)$$

$$= \frac{\lambda - A_{22}}{A_{12}} = \frac{\frac{1}{2}(A_{11} - A_{22}) - \frac{1}{2} \sqrt{A_{12}^2 + \frac{1}{4}(A_{11} - A_{22})^2}}{A_{12}} \quad \dots(7)$$

Het is eenvoudig na te gaan dat (4) de voorwaarde levert

$$d_{12} = d_{21} = 0, \text{ in:}$$

$$O^{-1}AO = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{pmatrix}.$$

De vergelijkingen (4) t/m (7) zijn equivalent.

In het algemene geval van een $n \times n$ -symm. reële matrix A , luidt O voor $p < q$:

$$O_{pq} = \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & \text{cost} & \text{sint} & \vdots \\ & & -\text{sint} & \text{cost} & \vdots \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^e \\ \vdots \\ q^e \end{pmatrix}$$

Vanwege (4) die levert dat $d_{pq} = d_{qp} = 0$ komt er voor (6) in het algemene geval:

$$t = \frac{\text{sign of } (A_{qq} - A_{pp}) * 2 A_{pq}}{|A_{qq} - A_{pp}| + \sqrt{(A_{qq} - A_{pp})^2 + 4A_{pq}^2}}, \quad \dots(8)$$

$$\text{dan is cost} = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \quad \text{en sint} = t \text{ cost} \quad \dots(9)$$

Voor het gemak nemen we nu $A_{pp} = V1$; $A_{pq} = V2$; en $A_{qq} = V3$;
verder $\mu = \frac{1}{2}(A_{pp} - A_{qq}) = \frac{1}{2}(V1 - V3)$;

$$\sqrt{= \sqrt{(V2)^2 + (\mu)^2}} \quad \text{en } \omega = \frac{\text{sign}(\mu)(-V2)}{\sqrt{}}$$

$$\text{En hiermee is } t = \frac{\text{sign}(\mu)(-V2)}{|\mu| + \sqrt{}} ; \text{ zodat cost} = \frac{\sqrt{1 + |\mu|}}{2\sqrt{}}$$

$$\text{en tenslotte sint} = \frac{\omega}{\sqrt{2(1 + \sqrt{1 - \omega^2})}} \quad \dots(10)$$

Merk op dat $\omega = -1$ als $\mu = 0$.

Deze overwegingen zijn toegepast: in CACM- Algorithm 85, Jacobi, door Th.G. Evans met certification 1 door J.S. Hillmore,

Het resultaat van een transformatiestap wordt dus

$$(d_{ik}) = D = O^{-1} A O, \text{ met}$$

outputregel:

$$d_{ip} = d_{pi} = A_{pi} \text{ cost} - A_{qi} \text{ sint} \quad \text{voor } i \neq p, q \quad 34$$

$$d_{iq} = d_{qi} = A_{pi} \text{ sint} + A_{qi} \text{ cost} \quad \text{voor } i \neq p, q \quad 32$$

$$d_{pp} = V1 \cos^2 t + V3 \sin^2 t - 2V2 \sin t \cos t \quad 39$$

$$d_{qq} = V1 \sin^2 t + V3 \cos^2 t + 2V2 \sin t \cos t \quad 40$$

$$d_{pq} = d_{qp} = V2(\cos^2 t - \sin^2 t) + (V1 - V3) \sin t \cos t \quad 41$$

$$d_{ik} = A_{ik} \quad \text{voor } i \neq p, k \neq q$$

In de certificatie 2 van CACM-Algorithm 85, door P. Naur, is een fout geslopen, daar staat:

$$d_{ip} = d_{pi} = A_{pi} \text{ cost} - A_{qi} + \text{sint.}$$

fout

In de kolommen van de matrix O^{-1} staan tenslotte de eigenvektoren van A als A op diagonaalgedaante gebracht is.

Noemen we $O^{-1} = S$, dan is $S=I$ als er nog geen draaiing plaatsgevonden heeft, en na k slagen is

$$S_k = S_{k-1} * S_{k-2} * \dots * S_1 * I.$$

```

'BEGIN' 'INTEGER' I,J,K,L,N; 'REAL' RHO; N:=6; RHO:='-13;
'BEGIN' 'REAL' APPAY A,S(/1:N,1:N/);
  'FOR' I:=1 'STEP' 1 'UNTIL' N 'DO'
    'FOR' J:=1 'STEP' 1 'UNTIL' N 'DO' A(/I,J):=1/(1+J-1);
'COMMENT' DEZE PROCEDURE VIND ALLE EIGENWAARDEN EN EIGENVEKTOREN VAN EEN
GEGEVEN VIERKANTE MATRIX MET EEN GEMODIFICEERDE JACOBI-METHODE;
'BEGIN' 'REAL' NORM1,NORM2,THR,MU,OMEGA,SINT,COST,INT1,V1,V2,V3;
  'INTEGER' P,Q,IND;
  'COMMENT' SET ARRAY S=N*N IDENTITY MATRIX;
  'FOR' I:=1 'STEP' 1 'UNTIL' N 'DO'
  'FOR' J:=1 'STEP' 1 'UNTIL' I 'DO'
  'IF' I=J 'THEN' S(/I,J):=1 'ELSE' S(/I,J):=S(/J,I):=0;
'COMMENT' CALCULATE INITIAL NORM(NORM1),FINAL NORM(NORM2) AND THRESHOLD;
INT1:=0;
'FOR' I:=2 'STEP' 1 'UNTIL' N 'DO'
'FOR' J:=1 'STEP' 1 'UNTIL' I-1 'DO' INT1:=INT1+2*A(/I,J)'POWER'2;
THR:=NORM1:=SQRT(INT1); NORM2:=(RHO/N)*NORM1; IND:=0;
MAIN1: THR:=THR/N; SPACE(20); FIXT(2,13,THR); NLGR;
'COMMENT' THE SWEEP THROUGH THE OFF-DIAGONAL ELEMENTS BEGINS HERE;
MAIN2: 'FOR' Q:=2 'STEP' 1 'UNTIL' N 'DO'
  'FOR' P:=1 'STEP' 1 'UNTIL' Q-1 'DO'
  'IF' ABS(A(/P,Q/)) 'NOT LESS' THR 'THEN'
  'BEGIN' IND:=1; V1:=A(/P,P/); V2:=A(/P,Q/);
    V3:=A(/Q,Q/); MU:=1/2*(V1-V3);
    OMEGA:= 'IF' MU=0 'THEN' -1
      'ELSE' -SIGN(MU)*V2/SQRT(V2'POWER'2+MU'POWER'2);
    SINT:=OMEGA/SQRT(2*(1+SQRT(1-OMEGA'POWER'2)));
    COST:=SQRT(1-SINT'POWER'2);
    'FOR' I:=1 'STEP' 1 'UNTIL' N 'DO'
    'BEGIN' 'IF' I 'NOT EQUAL' P 'AND' I 'NOT EQUAL' Q 'THEN'
      'BEGIN' INT1:=A(/I,P/); MU:=A(/I,Q/);
        A(/Q,I/):=A(/I,Q/):=INT1*SINT+MU*COST;
        A(/P,I/):=A(/I,P/):=INT1*COST-MU*SINT;
      'END'; INT1:=S(/I,P/); MU:=S(/I,Q/);
        S(/I,Q/):=INT1*SINT+MU*COST;
        S(/I,P/):=INT1*COST-MU*SINT;
      'END';
    A(/P,P/):=V1*COST'POWER'2+V3*SINT'POWER'2-2*V2*SINT*COST;
    A(/Q,Q/):=V1*SINT'POWER'2+V3*COST'POWER'2+2*V2*SINT*COST;
    A(/P,Q/):=A(/Q,P/):=V2*COST'POWER'2-V2*SINT'POWER'2+(V1-V3)*SINT*COST;
  'END'; 'COMMENT' NOW TEST TO SEE IF CURRENT TOLERANCE EXCEEDED
  AND, IF NOT, WHETHER FINAL TOLERANCE REACHED;
  'IF' IND=1 'THEN' 'BEGIN' IND:=0; 'GOTO' MAIN2 'END'
  'ELSE' 'IF' THR GREATER NORM2 'THEN' 'GOTO' MAIN1;
'END' 'END'; 'END';

```


Voor een 6×6 -Hilbert
matrix komt er:

DE HOVENGENS VAN DE BUITENDIAGONAAL-ELEMENTEN IS ACHTEREENVOLGENS:

+.2032863948536	+.000001082798	+.0006157483546
+.0338310658089	+.0012481939978	-.0622265881554
+.0056468443015	-.0356066414369	+.490839207850
+.0009411407169	+.2406780742516	-.5354769218375
+.0021560567862	-.6254603824445	-.4170376931661
+.000261427977	+.689807203273	+.0470340132928
+.0000043571329	-.2716054576408	+.5406815628348
+.000007261888		
+.000001210315		
+.000000201719		
+.000000033620		
+.000000005603		
+.000000000934		
+.000000000156		
+.000000000026		
+.000000000004		
+.000000000001		
+.000000000000		

DE EIGENWAARDEN EN DE RESP. EIGENVEKTOREN ZIJN:

+.1.618899589369	+.0153215213202	+.000001082798
-.2423600705767	+.2403253693437	+.0012481939978
-.6145444282950	-.6978513752825	-.0356066414369
+.2110024316805	-.2313893733312	+.2406780742516
+.3206968693232	+.1328631588086	-.6254603824445
+.2543113863403	+.3627149214603	+.689807203273
+.2115308400803	+.5027628667658	-.2716054576408
+.1814429766491	+.4591148146055	

De threshold Jacobi method.

Er rest nog te bepalen hoe het buitendiagonaalelement dat in iedere slag nul grmaakt wordt, gekozen moet worden. Eenvoudig is de threshold Jacobi method, deze komt erop neer dat per slag zolang door de buitendiagonaalelementen gezocht wordt totdat een element groter dan een drempelwaarde gevonden wordt. Dit element wordt dan nul gemaakt. Dit proces wordt netzolang herhaalt totdat voor ieder buitendiagonaal-element van de geïtereerde matrix geldt:

$$|A_{ij}| < p/n * \text{norm } 1.$$

$$i \neq j$$

Waarin p een vooraf gekozen nauwkeurigheidsfactor, bijvoorbeeld $p = 10^{-10}$, is en

$$\text{norm } 1 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n [A_{ij}]^2}.$$

Een bewijs van de convergentie voor deze methode is gegeven door J. Greenstadt 2) The determination of the charateristic roots of a matrix by the Jacobi method, in 'Mathematical methods for Digital Computers', A. Ralston and H.S. Wilf, eds.

Foutschattingen a-priori

De Jacobi-methode is gebaseerd op een gelijkvormigheids transformatie

$$A_p = H_p^{-1} A_{p-1} H_p \quad (p=1, \dots, s)$$

De originele matrix is A_0 en we krijgen een rij $A_1, A_2, \dots, A_s$. In de praktijk worden afrondfouten gemaakt, zodat matrices $\tilde{H}_p$ en $\tilde{A}_p$ verkregen worden. Voor een numeriek stabiel algoritme verwachten we matrices $\tilde{A}_p$ te berekenen die slechts een geringe verstoring hebben t.o.v. A_p . Een a-priori schatting van de foutgrens in de eigenwaarden verwachten we te verkrijgen via een schatting voor de grens van $\tilde{A}_p - A_p$. Dit is onjuist omdat als A_p exact gelijkvormig is met een matrix die licht verstoord is t.o.v. A_0 , dan zal de fout in iedere eigenwaarde in eerste instantie afhangen van zijn gevoeligheid voor verstoringen in de originele matrix A_0 . Echter zelfs in het gunstige geval van gelijkvormigheids transformaties van symmetrische matrices, zoals het onderhavige, kunnen we geen schattingen verkrijgen voor a-priori grenzen van fouten in de eigen-vektoren 3). Dus om a-priori grenzen te verkrijgen voor de fouten tengevolge van het gebruik van een algoritme hebben we grenzen nodig voor de equivalente perturbaties in de oorspronkelijke matrix A_0 en grenzen voor de gevoeligheden van de gewenste eigenwaarden.

De hilbert matrix $A_0 = (A_{i,j})$ met $A_{i,j} = \frac{1}{i+j-1}$

is normaal, d.w.z. $A^h A = A A^h$, immers $A^h = \bar{A}^t = A$.

A_0 is normaal en symmetrisch geperturbeerd met een matrix $\in B$, dan liggen volgens Henrici ⁴⁾ de eigenwaarden van $(A_0 + \in B)$ binnen de cirkels

$$|\lambda - \lambda_i| \leq \| \in B \|_2 \quad (\text{dit volgt uit Courant-Fisher}).$$

Als A_0 een bijna normale matrix is zullen zijn eigenwaarden redelijk gevoelig zijn voor verstoringen in A_0 .

De verstoringen die in A_0 ontstaan, worden veroorzaakt doordat (A_{ij}) niet exact voorstelbaar is als machinegetal voor alle i en j . Deze verstoringen zijn maximaal van de grootte $\frac{1}{2} * 10^{-13}$ voor een computer met 12 decimalen getalrepresentatie, dus voor een $6*6$ -matrix is

$$\| \in B \|_E = \left(\sum_{i,j} |\in B_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = 3 * 10^{-13}.$$

$$\text{Omdat } \| \in B \|_2 \leq \| \in B \|_E \text{ geldt er } |\lambda_i - \lambda| \leq 3 * 10^{-13},$$

dit is de a-priori bovengrens voor de fouten in de eigenwaarden. Een zwakke schatting voor de a-priori foutengrens van de eigenvectoren geeft Wilkinson op p. 281, met $\| \bar{R}^T - R^T \|_E \leq 8n2^{-t}$.

Dus voor een $6 * 6$ matrix met $t=13$ digits wordt dit $\leq 0,03$.

Schattingen m.b.v. Rayleigh-quotiënten voor fouten in de e.w.

μ_R is de Rayleigh-quotiënt, gedefinieerd door

$$\mu_R = \frac{V^H A V}{V^H V}, \text{ waarin } V \text{ eigenvektor van } A \text{ is,}$$

Onmiddellijk weten we $|\lambda_i - \mu_R| \geq 3 * 10^{-13} = a$

voor 5 eigenwaarden.

Omdat A_0 normaal is, hebben we (zie Wilkinson p. 173) onder de veronderstelling dat

$$A V - \mu_R V = \eta \quad (\| V \|_2 = 1 \text{ en } \| \eta \|_2 = \epsilon)$$

$$\text{de betrekking } |\mu_R - \lambda_1| \leq \frac{\epsilon^2}{a} / (1 - \frac{\epsilon^2}{a^2})$$

Voor een normale matrix A_0 is het systeem van eigenvectoren $\bar{x}_i$ ($i = 1, \dots, n$) ortogonaal en dus zonder verlies van algemeenheid orthonormaal. Laat benaderingen $x_1, \dots, x_n$ voor de eigenvectoren gegeven zijn.

Dan $\eta^T V = 0$ en er volgt $\| n V^T + V n^T \|_2 = \| \eta \|_2 = \epsilon$, (Wilkinson p.175) als $\| V \|_2 = 1$ en $V = \sum_1^n \alpha_i x_i$, $\sum_1^n |\alpha_i|^2 = 1$.

Uit (11) is dan de bovengrens te berekenen voor de fout waarmee de Rayleigh-quotiënten de eigenwaarden benaderen.

Voor een a-posteriori schatting van de foutgrenzen in de eigenvektoren en eigenwaarden bedenken we dat Jacobi bijna perfect orthogonale eigenvektoren oplevert, zodat we mogen nemen $\epsilon \leq 2 \cdot 10^{-13}$.

Dus er is tenminste een eigenwaarde in ieder van de intervallen

$|\lambda - \mu_i| \leq \epsilon$, waarin μ_i de berekende eigenwaarden zijn.

We vinden dat de foutgrenzen in de eigenwaarden zijn

$$|\mu_i - \lambda| \leq \frac{4 \cdot 10^{-26}}{3 \cdot 10^{-13}} \cdot \left(1 + \left[\frac{4 \cdot 10^{-26}}{3 \cdot 10^{-13}}\right]^2\right) \leq 2 \cdot 10^{-13}.$$

A_0 is hermiets en de berekende eigenwaarden liggen niet pathologisch dicht bij elkaar, zodat de foutgrens a-posteriori voor de eigenvektoren bepaald wordt door ϵ .

en a-posteriori

De nauwkeurigheden a-priori van de eigenwaarden zijn vrijwel gelijk, die van de eigenvektoren blijken de verwachtingen verre te overtreffen.

Dit laatste is te wijten aan de onmogelijkheid zoals Wilkinson opmerkt, om een goede a-priori schatting te doen van de foutgrenzen in de eigenvektoren.

Literatuur

1. G.J. Jacobi Werke Band III, pp. 97-144
2. J. Greenstadt "The determination of the characteristic roots of a matrix by the Jacobi method", in: Mathematical methods for Digital Computers, A. Ralston, H.S. Wilf (eds.)
3. J.H. Wilkinson The Algebraic Eigenvalue Problem, Clarendon Press, Oxford, 1965
4. P. Henrici "Bounds for iterates, inverses, spectral variation and fields of values of non-normal matrices", Numerische Math, 4, 1962, pp. 24-40.
5. Th.G. Evans "Jacobi", Algorithm 85 in: The Collected Algorithms of the ACM.