Bizonyos tipusú függvénymátrix számolása

Koszó Gábor – Gergely József

Az [1] cikkben felvetett és megoldott feladat kapcsán jutottunk az alább ismertetett problémához, ami a legkisebb négyzetek módszere alkalmazásánál részproblémaként merült fel. Az [1] cikk utal a problémára, de megoldásával nem foglalkozik.

Legyen adott a (3 dimenziós) térben n pont. A pontokat összekötő távolságok nem függetlenek egymástól, lesznek olyan távolságok, melyek a többi távolság függvényeként kifejezhetők. Az [1] cikkben leírt feladat megoldása közben a következő problémák merültek fel:

1./ meghatározandó az r_i független távolságok száma és ezen független távolságok kiválasztásának szabálya

2./ hogyan lehet a független távolságok segítségével kifejezni a függő távolságokat (d -ket)

3./ a legkisebb négyzetek módszerével megoldandó feladathoz elkészíteni a derivált mátrixot, melynek elemei:

$$[a_{ij}] = \left[\frac{\partial d_j}{\partial r_i}\right] \qquad \begin{array}{l} i = 1,\ldots,3(n-2) \\ j = 1,\ldots,\dfrac{n^2-7n-12}{2} \end{array}$$

I. A problémát először 4 és 5 pont esetében vizsgáljuk. Mivel 3 pont legfeljebb síkot (2 dim. teret) feszíthet ki, legalább 4 pont szükséges a 3 dim. tér "kifeszítéséhez". 4 pontnak egymáshoz viszonyított helyzetét pl. úgy fixálhatjuk, ha $\binom{4}{2} = 6$ távolságát megadjuk.

Itt minden távolság független, ha a 4 pont nincs egy síkban.

5 pont esetén a távolságok száma $\binom{5}{2} = 10$, azaz 4-el több mint 4 pont esetén, de ha a térbeli 4 ponthoz hozzávesszük az 5.-et (mivel 3 dimenziós térről van szó) ennek az 5 pontnak a helyzetét a többihez viszonyítva már 3 távolság meghatározza. A 4. távolság már nem rögzíthető tetszőlegesen, hanem ha ezt d-vel jelöljük, akkor

$$d = f(r_1, r_2, \ldots, r_9).$$

Ezt a függvényt könnyen meghatározhatjuk felhasználva a geometria következő tételét: A (három dimenziós) térben adott 4 pont akkor és csak akkor van egy (eggyel alcsonyabb dimenziós térben) síkban, ha a következő determináns értéke 0:

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & a^2 & b^2 & c^2 \\ 1 & a^2 & 0 & d^2 & e^2 \\ 1 & b^2 & d^2 & 0 & f^2 \\ 1 & c^2 & e^2 & f^2 & 0 \end{vmatrix} = 0 ,$$

ahol $a, b, \dots, f$ a pontoknak egymástól való távolsága. Ha tehát a távolságokból 5-öt ismerünk, a hatodik meghatározható a fenti egyenletből (feltéve, hogy egy síkban vannak).

Megjegyzés: d -re két értéket kapunk. A kettő közül azt fogadjuk el jónak, amelyik a kisérleti adatoknak jobban megfelel.

A fentiek analógiájára a "4 dimenziós térben" adott 5 pont akkor és csak akkor van "egy 3 dimenziós térben" ha a fentihez hasonló determináns

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & r_1^2 & r_2^2 & r_3^2 & r_4^2 \\ 1 & r_1^2 & 0 & r_5^2 & r_6^2 & r_7^2 \\ 1 & r_2^2 & r_5^2 & 0 & r_8^2 & r_9^2 \\ 1 & r_3^2 & r_6^2 & r_8^2 & 0 & r_{10}^2 \\ 1 & r_4^2 & r_7^2 & r_9^2 & r_{10}^2 & 0 \end{vmatrix} =$$

$$= F(r_1, r_2, \dots, r_{10}) = 0 .$$

Ebből a 9 távolság ismeretében a tizedik távolság meghatározható:

$$d = f(r_1, r_2, \dots, r_9) .$$

Az implicit függvény deriválási szabályát alkalmazva megkaphatjuk a keresett mátrixot is.

$$\frac{\partial r_i}{\partial r_j}(r_1,\dots,r_{i-1},r_{i+1},\dots,r_{10}) = -\frac{F'_{r_i}(r_1,\dots,r_{10})}{F'_{r_j}(r_1,\dots,r_{10})}$$

$$i = 1, 2, \dots, 10 .$$

II. A pontok számát n -re növelve a független távolságok száma az előző $(n-1)$ ponthoz tartozó független távolságok számához képest mindig 3-mal lesz több. Azaz pl. N pont esetén

az összes távolság	$\binom{N}{2}$
a független távolságok száma	$3(N-2)$
a függő távolságok száma	$\binom{N}{2} - 3(N-2) = \frac{N^2 - 7N - 12}{2}$

Az 5-nél több pont esetében úgy alkalmazzuk az előbbi eljárást, hogy mindig kiválasztunk 5 olyan pontot, amelyek 10 távolsága közül 9-et már ismerünk. A már kiszámított távolságokat ismertnek tekintve a tizedik távolság kiszámítható.

Az általunk vizsgált molekuláknál a megfelelő 5 pont kiválasztását mindig könnyen el lehetett érni.

III. A gyakorlatban problémák léptek fel a d (függő távolságok) számolásával kapcsolatban. A d értékét másodfokú egyenletből kapjuk. Geometriailag vizsgálva az egyenlet két megoldása nem más, mint két kör metszéspontjának a meghatározása.

1./ A számolás pontatlanságából fellépő hibák miatt a diszkrimináns értéke negatív is lehet, vagy túl kicsi pozitív. Ebben az esetben tehát, ha
| diszkrimináns | $< \varepsilon$, két kör érintkezéséről van szó és a diszkr. értékét 0 -nak vettük. Ezáltal egyértelművé tettük a megoldást.

2./ Ha a kapott 2 db d értékre a következő teljesül:

$$|d_1 - \text{a kísérletileg mért } d| =$$
$$|d_2 - \quad \text{–}\,\text{"}\,\text{–} \quad | ,$$

akkor ennek a d -nek a meghatározására egy másik 5 pontból álló pontrendszer távolságait választjuk.

Irodalom

[1] Gergely József, Elektron-diffrakciós mérési adatok kiértékelése legkisebb négyzetek módszerével. Közlemények 4(1968) 46-53.

Summary

Calculation of certain type function matrices.

The paper discusses a numerical solution of a geometric problem which came up from computation in [1].

Резюме

Вычисление определенных функциональных матриц

В статье исследуется вычислительное решение одной геометрической проблемы, которая возникла из вычислений в статье [1].