Discussion Paper

Naar een gevoeligheidsanalyse voor het binnenwerk van I/O tabellen

2017 | 22

Frank P. Pijpers

Er is behoefte aan een verfijning van procedures om I/O tabellen op te kunnen stellen, en ook procedures om interacties tussen bedrijven in kaart te kunnen brengen, ook wanneer er onvolledige informatie beschikbaar is over alle individuele interacties. Uitgaande van een minimale set van gegevens, over randtotalen van interactie- cq. I/O-tabellen, kan een beeld opgebouwd worden van tabellen die aan alle randvoorwaarden voldoen, waarop vervolgens een gevoeligheidsanalyse uitgevoerd kan worden voor eventuele extra toe te voegen informatie, zoals beperkingen op of voorwaarden voor bepaalde celwaarden of interacties.

1 Inleiding

Bij het onderzoeken van transacties tussen bedrijven, of het samenstellen van I/O tabellen voor bedrijfstakken, komt het voor dat randtotalen voor de input of output wel bekend zijn maar er beperkte of partiële kennis of zelfs geen kennis is over het binnenwerk van de tabel: dwz. welke fractie van geld, goederen of diensten, van een bepaald input kanaal naar een bepaald output kanaal stroomt.

Het is daarom wenselijk om een praktisch bruikbare techniek te hebben waarmee het binnenwerk van een transactie- cq. I/O-tabel gebouwd kan worden die in ieder geval aan de, bekend veronderstelde, randtotalen voldoet. Ook is het wenselijk om alle items van additionele informatie, in de vorm van zachte of harde voorwaarden, zoveel mogelijk onafhankelijk van elkaar in rekening te kunnen brengen in het binnenwerk, zonder de randtotalen te verstoren.

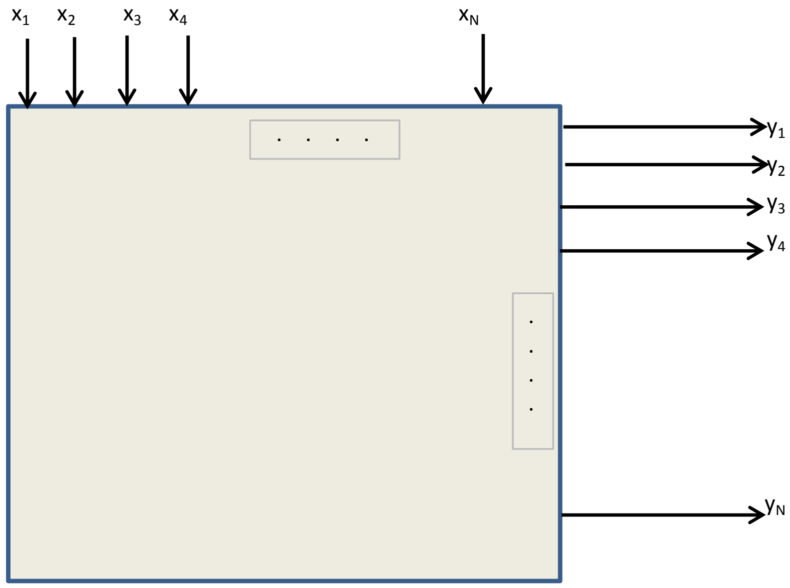
In dit rapport wordt een stappenplan beschreven voor een proces dat deze eigenschappen heeft. Dit proces kan in software naar keuze geïmplementeerd worden, zoals bijvoorbeeld R.

Bij een systeem waarin N input en output kanalen bestaan, is het aantal vrijheidsgraden N^2, terwijl er zonder informatie buiten de randtotalen zelf, er slechts (maximaal) $2N$ lineaire voorwaarden kunnen worden opgesteld. Door een geschikte keuze van basiselementen voor het binnenwerk kan echter in kaart gebracht worden welke mogelijkheden er zijn voor aanpassingen daarin, waardoor het mogelijk wordt om te bepalen hoe gevoelig de tabel is voor iedere additionele voorwaarde die opgelegd kan worden.

2 Probleembeschrijving

In het meest extreme geval is bij op te stellen I/O tabellen niets bekend over welke proporties van de inputs x naar welke outputs y vloeien. Schematisch is het hele netwerk van bedrijven dan een zwarte doos, waarbinnen de boekhoudkundige stromen van middelen (geld, goederen, diensten) x_i die binnen komen, herverdeeld worden naar de uitstroom y_j waarbij de indices i, j van 1 tot N lopen. Schematisch is de dichte doos in figuur 2.1 dan een herverdelingsmatrix waarvan alle elementen onbekend zijn. Twee extremen van mogelijkheden voor een herverdeling zijn dat ofwel iedere input stroom gelijkelijk over alle output stromen verdeeld is, ofwel dat er geen enkele verdeling optreedt en iedere input stroom volledig naar slechts 1 output kanaal gaat.

Figure 2.1 Schema van het netwerk als zwarte doos: input x en output y per bedrijf (cq. bedrijfstak) zijn bekend, maar welke proportie van x naar y vloeit is onbekend



Er wordt van uit gegaan dat de som van alle stromen in en uit (de som van de randtotalen) bekend, en gelijk is:

$$\begin{aligned} C_{Tot} &= \sum_i x_i \\ C_{Tot} &= \sum_j y_j \end{aligned} \tag{1}$$

Verder moet gelden dat:

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_i w_{ji} \quad \forall\, i \\ y_j &= \sum_i w_{ji} x_i \quad \forall\, i \end{aligned} \tag{2}$$

waar de x_i en y_j bekend zijn, en de gewichten w_{ji} onbekend. Dit probleem is onderbepaald, omdat er minder lineaire vergelijkingen zijn, namelijk $2N$, dan onbekenden: N^2. Vgl. (2) kan herschreven worden in vector cq. matrix notatie als:

$$\begin{aligned} y &= W \cdot x \\ 1 &= W \cdot 1 \end{aligned} \tag{3}$$

waarbij x en y kolomvectoren zijn met resp. de input en output, en W de matrix van gewichten is. In vgl. (3) geldt dat 1 een kolomvector is met hetzelfde aantal elementen N als de vectoren x en y, en waarin ieder element gelijk is aan 1.

2.1 stap 1: kleinste kwadraten oplossing als 1^e orde benadering

Definieer de identiteits matrix I en een matrix $\tilde{1}$. I is de $N \times N$ identiteitsmatrix, en heeft alle diagonaal-elementen $= 1$ en alle overige elementen $= 0$. Voor de $N \times N$ matrix $\tilde{1}$ geldt dat ieder element gelijk is aan 1. De vertaling van de mogelijkheid dat iedere input gelijkelijk over alle outputs wordt verdeeld, betekent voor de gewichtenmatrix W dat:

$$W = \frac{1}{N}\tilde{1} \tag{4}$$

Aan het andere uiteinde van dit spectrum zit de aanname dat er geen enkele herverdeling tussen input en output optreedt, hetgeen zich vertaalt in:

$$W = I \tag{5}$$

Een eerste stap in de analyse is daarom te veronderstellen dat de gewichten matrix opgebouwd wordt als:

$$W = \alpha I + \frac{1-\alpha}{N}\tilde{1} + E \equiv \widetilde{W}(\alpha) + E \tag{6}$$

Hierin wordt de $N \times N$ matrix E gebruikt om alle afwijkingen in samen te vatten, die niet passen in een lineaire combinatie van de matrices I en $\tilde{1}$. De tweede vgl. van (3) betekent dat voor E moet gelden dat:

$$E \cdot 1 = 0 \tag{7}$$

De factor α geeft de balans tussen de twee extreme aannames, en de optimale waarde in een kleinste kwadraten zin hiervan kan worden bepaald. Daartoe wordt voor de parameter α geminimaliseerd:

$$\begin{aligned}
&(y - \widetilde{W} \cdot x)^T \cdot (y - \widetilde{W} \cdot x) = \\
&= (y - \alpha x - (1-\alpha)\overline{x}1)^T \cdot (y - \alpha x - (1-\alpha)\overline{x}1) \\
&= y^T \cdot y - \alpha y^T \cdot x - (1-\alpha)\overline{x}y^T \cdot 1 + \\
&\quad -\alpha x^T \cdot y + \alpha^2 x^T \cdot x + \alpha(1-\alpha)\overline{x}x^T \cdot 1 + \\
&\quad -(1-\alpha)\overline{x}1^T \cdot y + \alpha(1-\alpha)\overline{x}1^T \cdot x + (1-\alpha)^2\overline{x}^2 1^T \cdot 1+
\end{aligned} \tag{8}$$

Hier is $\overline{x}$ het gemiddelde van alle inputs x_i. Verder kan gebruik gemaakt worden van:

$$\begin{aligned}
&1^T \cdot 1 = N \\
&x^T \cdot 1 = 1^T \cdot x = N\overline{x} \\
&y^T \cdot 1 = 1^T \cdot y = N\overline{y} \\
&x^T \cdot x = \sum_i x_i^2 \\
&y^T \cdot x = x^T \cdot y
\end{aligned} \tag{9}$$

zodat vgl. (8) kan worden herschreven als:

$$\begin{aligned}
&(y - \widetilde{W} \cdot x)^T \cdot (y - \widetilde{W} \cdot x) = \\
&= y^T \cdot y - 2\alpha x^T \cdot y - 2N(1-\alpha)\overline{x}\,\overline{y} + \alpha\sum_i x_i^2 + (1-\alpha^2)N\overline{x}^2
\end{aligned} \tag{10}$$

Minimaliseren voor α houdt in dat de afgeleide hiervan naar α op 0 wordt gezet:

$$\begin{aligned}
0 &= -2x^T \cdot y + 2N\overline{x}\,\overline{y} + 2\alpha\left(\sum_i x_i^2 - N\overline{x}^2\right) \\
&= -2x^T \cdot y + 2N\overline{x}\,\overline{y} + 2\alpha N\sigma_x^2
\end{aligned} \tag{11}$$

waar gebruik is gemaakt van (7) en waar σ_x^2 gedefinieerd is als:

$$\sigma_x^2 \equiv \frac{1}{N}\sum_i x_i^2 - \overline{x}^2 \tag{12}$$

De oplossing hiervan is α gelijk te stellen aan:

$$\alpha = \frac{x^T \cdot y - N\overline{x}\,\overline{y}}{N\sigma_x^2} \tag{13}$$

Hiermee wordt in feite een lineaire regressie bepaald van y als functie van x .

2.2 stap 2: constructie van de matrix die aan alle randtotalen voldoet

Gebruik makend van de α zoals in stap 1 bepaald worden variabelen $\tilde{x}$ en $\tilde{y}$ gedefinieerd:

$$\begin{aligned} \tilde{x} &\equiv x - \bar{x}1 \\ \tilde{y} &\equiv y - \left(\alpha I + \frac{1-\alpha}{N}\tilde{1}\right) \cdot x = E \cdot x = E \cdot \tilde{x} \end{aligned} \tag{14}$$

Er is geen unieke oplossing voor E, maar oneindig veel oplossingen. Wanneer iedere rij j van E voldoet aan:

$$e_{ji} = \frac{\tilde{y}_j}{N\sigma_x^2}\tilde{x}_i \quad \forall\, i,j \tag{15}$$

In matrix-vector notatie is (15) te schrijven als:

$$E = \frac{1}{N\sigma_x^2}\tilde{y}\tilde{x}^T \tag{16}$$

Uit de definitie (14) van $\tilde{x}$ volgt dat $\tilde{x}^T \cdot 1 = 0$ en dus voldoet E aan voorwaarde (7). Verder geldt ook per definitie dat $\tilde{x}^T \cdot \tilde{x} = N\sigma_x^2$ en daardoor voldoet E ook aan de tweede vgl. van (14). Er is echter een $N-2$ dimensionale ruimte waarbinnen alle vectoren e_j voldoen aan dezelfde eisen. Het is daarom zinvol om een set van basisvectoren B te construeren die deze ruimte opspannen. Wanneer additionele voorwaarden voor het binnenwerk in rekening gebracht moeten worden, wordt dat gedaan door gebruik te maken van aleen deze basisvectoren. Op deze manier wordt dan de tabel altijd expliciet aangepast zonder de randtotalen te beïnvloeden, waardoor voorkomen wordt dat er iteratie nodig is. De constructie van de basisset wordt besproken in sectie 3.

De constructie van W met behulp van deze E heeft nog een eigenschap die het vermelden waard is, namelijk dat niet alleen de sommatie per rij maar ook de sommatie per kolom van de gewichten gelijk is aan 1, dwz. $W^T \cdot 1 = 1$. In de definitie (6) van W zijn de eerste twee elementen symmetrisch zodat voor deze elementen automatisch aan de voorwaarde wordt voldaan. Uit de definitie (16) blijkt verder dat:

$$\begin{aligned} E^T \cdot 1 &= \frac{1}{N\sigma_x^2}\tilde{x}\tilde{y}^T \cdot 1 \\ &= \frac{1}{N\sigma_x^2}\tilde{x}\left[y^T \cdot 1 - x^T \cdot \left(\alpha I + \frac{1-\alpha}{N}\tilde{1}\right) \cdot 1\right] \\ &= \frac{1}{N\sigma_x^2}\tilde{x}\left[N\bar{y} - N\bar{x}\right] \\ &= 0 \end{aligned} \tag{17}$$

waarbij de laatste gelijkheid volgt uit (1). Hiermee is duidelijk dat inderdaad $W^T \cdot 1 = 1$

2.3 Variant van probleemstelling

Voor sommige problemen geldt dat de gewichten niet noodzakelijkerwijs per rij moeten sommeren tot 1 maar wel over de kolommen, m.a.w.:

$$\begin{aligned} y &= W \cdot x \\ 1 &= W^T \cdot 1 \end{aligned} \tag{18}$$

Uit sectie 2.2 blijkt dat de gekozen constructie van E inhoudt dat automatisch al aan deze conditie wordt voldaan. Een matrix van gewichten w_{ji} die wel aan (18) voldoet, maar niet noodzakelijkerwijs aan (3), is:

$$w_{ji} = \frac{y_j}{\sum_j y_j} \equiv \frac{y_j}{\sum_i x_i} \tag{19}$$

Er is echter ook een andere mogelijke aanpak om tot een geldige oplossing te komen, geïnspireerd op een aanpak van Willenborg (2017). De eerste stap is hier om de ratio $d_{ii} = \min(y_i/x_i, 1)$ te bepalen en de kanalen te sorteren naar toenemende waarde van de d_{ii}. De gewichtenmatrix W, na deze sortering, kan dan worden opgesplitst als volgt:

$$W = \begin{pmatrix} D & 0 \\ B & I \end{pmatrix} \tag{20}$$

Waarin D een $M \times M$ diagonale matrix is met $M < N$, waarvan de diagonaal elementen d_{ii} precies voldoen aan de waarden (y_i/x_i) wanneer deze kleiner zijn of gelijk aan 1. Er zijn dan $N - M$ over waar die waarde groter is dan 1. $(N - M) \times (N - M)$ is de dimensie van de identiteitsmatrix I. De elementen van de subdiagonaal matrix B voldoen aan

$$B_{ij} = \frac{1}{N-M} \frac{y_j - x_j}{\overline{y} - \overline{x}} (1 - d_{ii}) \quad \forall\ M < j \leq N\,,\ i \leq M \tag{21}$$

Hier worden de gemiddelden $\overline{x}$ en $\overline{y}$ bepaald over de subset van alleen de $(N - M)$ waarden van i waarvoor de ratio $y_i/x_i > 1$. Deze expliciete constructie maakt het mogelijk om (18) te herformuleren. De eerste stap in de herformulering is het vermenigvuldigen van alle termen aan de linker- en rechterzijde van de tweede vergelijking in (18) met W:

$$\begin{aligned} y &= W \cdot x \\ W \cdot 1 &= WW^T \cdot 1 \end{aligned} \tag{22}$$

De matrix WW^T kan uitgeschreven worden:

$$V \equiv WW^T = \begin{pmatrix} D^2 & DB^T \\ BD & I + BB^T \end{pmatrix} \tag{23}$$

en de vermenigvuldiging met de vector 1 is een eenvoudige sommatie over de rijen van deze matrix. De matrix $V \equiv WW^T$ is symmetrisch en heeft als inverse:

$$V^{-1} = \begin{pmatrix} D^{-2} + D^{-1}B^TBD^{-1} & -D^{-1}B^T \\ -BD^{-1} & I \end{pmatrix} \tag{24}$$

waarbij de inverse D^{-1} van een diagonaalmatrix D triviaal te bepalen is. Met behulp van V^{-1} kan vervolgens (22) herschreven worden als:

$$\begin{aligned} \tilde{y} &= \widetilde{W} \cdot x \\ 1 &= \widetilde{W} \cdot 1 \end{aligned} \tag{25}$$

waarbij gebruik is gemaakt van de definities:

$$\begin{aligned} \tilde{y} &\equiv V^{-1}y \\ \widetilde{W} &\equiv V^{-1}W = \begin{pmatrix} D^{-1} & -D^{-1}B^T \\ 0 & I \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{26}$$

Dit betekent dat het probleem gedefineerd door (18) gereduceerd is tot probleem (3) en dat dezelfde vervolgstappen kunnen worden gezet (stap 3: zie sectie 3) om tot een oplossing te komen voor mogelijke toegestane correcties. De procedure van de herdefiniëring van variabelen van vgl. (26) is inverteerbaar, dus zodra een oplossing is gevonden kan deze weer terug worden getransformeerd naar de oorspronkelijke variabelen.

2.4 Geblokt probleem

Een andere variant van dit probleem treedt op als er een hiërarchie is. In de meest simpele vorm betekent dit dat de input en output kanalen verdeeld kunnen worden over twee subgroepen. In deze variant is binnen ieder van die twee subgroepen al het binnenwerk wel bekend, maar tussen leden van twee verschillende subgroepen niet. In matrix-vorm uitgeschreven houdt dit in:

$$y = W \cdot x \tag{27}$$

$$W = \begin{pmatrix} A & B \\ B' & C \end{pmatrix} \tag{28}$$

Hierin zijn de matrices A en C, die de uitwisseling tussen kanalen binnen ieder van de twee groepen beschrijven, geheel bekend. De matrices B en B' zijn onbekend. De matrices A en C zijn vierkant, en voor wat volgt wordt voor het gemak verondersteld dat de matrix A dimensies $I \times I$ heeft en de matrix C dimensies $J \times J$, waarbij $J \leq I$.

In dit geval is het zinvol om de bekende delen te elimineren uit het probleem. Dat kan worden gedaan door van de x en y de bekende delen af te trekken:

$$\begin{aligned}
\tilde{x}_{k'} &= x_{k'}\left(1 - \sum_k A_{k\,k'}\right) \quad \forall\, k, k' \leq I \\
\tilde{y}_k &= y_k - \sum_{k'} A_{k\,k'} x_{k'} \quad \forall\, k, k' \leq I \\
\tilde{x}_{I+k'} &= x_{I+k'}\left(1 - \sum_k C_{k\,k'}\right) \quad \forall\, k, k' \leq J \\
\tilde{y}_{I+k} &= y_{I+k} - \sum_{k'} C_{k\,k'} x_{k'} \quad \forall\, k, k' \leq J
\end{aligned} \tag{29}$$

Met deze definities voor $\tilde{x}$ en $\tilde{y}$ kan (27) namelijk worden herschreven als:

$$\begin{aligned}
\tilde{y} &= W \cdot \tilde{x} \\
W &= \begin{pmatrix} 0 & B \\ B' & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{30}$$

Hier is de matrix B rechthoeking met I rijen en J kolommen, en B' rechthoekig met J rijen en I kolommen. W is niet noodzakelijkerwijs symmetrisch en dus zijn B en B' niet noodzakelijkerwijs elkaars getransponeerde. Er moet verder gelden dat deelsommaties kruislings gelijk moeten zijn:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{I} \tilde{x}_k &= \sum_{k'=I+1}^{I+J} \tilde{y}_{k'} \\
\sum_{k=I+1}^{I+J} \tilde{x}_k &= \sum_{k'=1}^{I} \tilde{y}_{k'}
\end{aligned} \tag{31}$$

Vervolgens kunnen de elementen van B en B' bepaald worden als:

$$\begin{aligned}
B_{ij} &= \frac{\tilde{y}_i}{\sum_{k=I+1}^{I+J} \tilde{x}_k} \quad \forall\, i \leq I, \forall\, I < j \leq J \\
B'_{ji} &= \frac{\tilde{y}_j}{\sum_{k=1}^{I} \tilde{x}_k} \quad \forall\, i \leq I, \forall\, I < j \leq J
\end{aligned} \tag{32}$$

Met deze keuzes voldoet de matrix W aan:

$$\begin{aligned}
\tilde{y} &= W \cdot \tilde{x} \\
1 &= W^T \cdot 1
\end{aligned} \tag{33}$$

en is dit probleem nu identiek aan (18) uit sectie 2.3. In dit geval heeft W de vorm (30) en dus geldt dat:

$$WW^T = \begin{pmatrix} BB^T & 0 \\ 0 & B'B'^T \end{pmatrix} \tag{34}$$

Deze matrix is weliswaar symmetrisch maar heeft niet noodzakelijkerwijs een inverse omdat deze een of meerdere eigenwaarden $= 0$ kan hebben. Dat betekent dat de stappen uit sectie 2.3 vanaf (25) niet vanzelfsprekend kunnen worden gevolgd om dit probleem om te vormen naar die van (3). Een tussenstap is nodig om dit te bereiken, waarvoor de vector z wordt gedefinieerd:

$$z \equiv (1-\epsilon)\tilde{y} + \epsilon\tilde{x} \tag{35}$$

met $1 \geq \epsilon > 0$. Vanwege (33) geldt voor z dat:

$$\begin{aligned} z &= [(1-\epsilon)W + \epsilon I] \cdot \tilde{x} \\ 1 &= [(1-\epsilon)W + \epsilon I]^T \cdot 1 \end{aligned} \tag{36}$$

In plaats van een inverse voor de matrix WW^T is nu een inverse nodig van:

$$\begin{aligned} M &\equiv [(1-\epsilon)W + \epsilon I]\,[(1-\epsilon)W + \epsilon I]^T \\ &= \begin{pmatrix} \epsilon I & (1-\epsilon)B \\ (1-\epsilon)B' & \epsilon I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon I & (1-\epsilon)B'^T \\ (1-\epsilon)B^T & \epsilon I \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \epsilon^2 I + (1-\epsilon)^2 BB^T & \epsilon(1-\epsilon)\left(B'^T + B\right) \\ \epsilon(1-\epsilon)\left(B' + B^T\right) & \epsilon^2 I + (1-\epsilon)^2 B'B'^T \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{37}$$

In tegenstelling tot (34) is M niet singulier zolang $1 \geq \epsilon > 0$. Met de definities:

$$\begin{aligned} \tilde{z} &\equiv M^{-1} z \\ \widetilde{W} &\equiv M^{-1}\,[(1-\epsilon)W + \epsilon I] \end{aligned} \tag{38}$$

geldt dat:

$$\begin{aligned} \tilde{z} &= \widetilde{W} \cdot x \\ 1 &= \widetilde{W} \cdot 1 \end{aligned} \tag{39}$$

en is het probleem weer gereduceerd tot probleem (3) en kunnen dezelfde vervolgstappen worden gezet (stap 3: zie sectie 3) om tot een oplossing te komen voor mogelijke toegestane correcties op $\widetilde{W}$. De procedure van de herdefiniëring van variabelen van vgl. (38) is inverteerbaar, dus zodra een oplossing is gevonden kan deze weer terug worden getransformeerd naar de oorspronkelijke variabelen.

3 stap 3: constructie van basisvectoren voor binnenwerk correcties

Het heeft de voorkeur om iedere additionele voorwaarde voor het binnenwerk zodanig toe te voegen dat er aan de randtotalen voldaan blijft worden. Voor een bepaalde, bekende, vector $\tilde{x}$

met lengte N van inputs zijn er in principe $(N-2)$ lineair onafhankelijke basis-vectoren B waarvoor geldt dat:

$$B^T \cdot \tilde{x} = 0$$
$$B^T \cdot 1 = 0 \tag{40}$$

Een mogelijke constructie, die bepaalde voordelen heeft, is alsvolgt. Defineer:

$$x_b = \min(x_i) \quad \forall\, i = 1, \dots, N$$
$$x_t = \max(x_i) \quad \forall\, i = 1, \dots, N \tag{41}$$

waarbij dus b en t de indices zijn voor resp. de kleinste en grootste waarde van x, en dus ook van $\tilde{x}$. Van de rijvector B_j^T is in wat volgt B_{jk}^T een willekeurig element zolang k maar ongelijk is aan index b of index t. Er zijn dus $N-2$ keuzes voor element B_{jk}^T. Een set van $(N-2)$ basisvectoren B_j^T is dan alsvolgt op te bouwen, gebruikmakend van deze definities:

$$B_{jb}^T = \frac{1}{|L_k|}(\tilde{x}_k - \tilde{x}_t) = \frac{1}{|L_k|}(x_k - x_t) \quad k \neq t$$
$$B_{jt}^T = \frac{1}{|L_k|}(\tilde{x}_b - \tilde{x}_k) = \frac{1}{|L_k|}(x_b - x_k) \quad k \neq b$$
$$B_{jk}^T = \frac{1}{|L_k|}(\tilde{x}_t - \tilde{x}_b) = \frac{1}{|L_k|}(x_t - x_b) \tag{42}$$
$$B_{ji}^T = 0 \quad \forall i \neq b, t, k$$

waarin:

$$|L_k| \equiv \sqrt{2\left(x_b^2 + x_t^2 + x_k^2 - x_k x_b - x_k x_t - x_b x_t\right)} \tag{43}$$

de index k kan hierin alle waarden $\{1, \dots, N\}$ aannemen **behalve** de waarden b en t, dus gezamenlijk zijn dit $(N-2)$ basisvectoren, die ieder N elementen hebben. De normalisatie factor $|L_k|$ is gebruikt om iedere vector B_j^T een lengte 1 te geven:

$$\sqrt{\sum_{k=1}^{N} \left(B_{jk}^T\right)^2} \equiv 1 \tag{44}$$

In wat volgt ligt het voor de hand om de vector van elementen $\tilde{x}$ te sorteren van klein naar groot, en dus worden ook de basisvectoren B_j^T herordend zodat index $b = 1$ en index $t = N$ per definitie. Dit houdt in dat ook de kolommen van W en E worden herordend voor een consistent gebruik van de indices. Na deze herordening geldt dat voor de k^e basisvector B_k^T, het element $B_{k\ k+1}^T \neq 0$, en ook $B_{k\ 1}^T \neq 0$ en $B_{k\ N}^T \neq 0$. Alle andere elementen van $B_k^T = 0$. Het voordeel van het gebruik van deze basisvectoren, wanneer één of meerdere extra voorwaarden opgelegd worden aan het binnenwerk, is:

- de som van de rijen van matrixgewichten blijft 1
- alle outputs, berekend als de de som over alle inputs per rij van gewicht × input, blijven gelijk aan de waargenomen outputs.
- iedere opgelegde binnenwerk correctie past een minimaal aantal cellen (namelijk 3) aan, die allen op één rij staan.
- bij gebruik van de k^e basisvector B_k^T, waarin $B_{k\ k+1}^T \neq 0$, om te voldoen aan een voorwaarde voor cel $j(k+1)$ van de tabel (de matrix W), zijn de correcties op alle andere cellen (op dezelfde rij) kleiner in absolute waarde.

Deze keuze heeft echter wel de consequentie dat de cellen voor de (gesorteerde) inputs x_1 en x_N altijd bij de correcties voor andere cellen betrokken worden. Omdat geldt dat iedere lineaire combinatie van de B^T vectoren ook de vereiste eigenschappen hebben, is het echter eenvoudig om een andere keuze te maken.

In speciale situaties kan het voorkomen dat er minder dan 3 cellen op een rij aangepast moeten worden, voor op te leggen aanpassingen die een bepaalde voorwaarde voor een cel-waarde moeten bewerkstelligen. Dit gebeurt als er voor twee of meer verschillende k gelijke x_k zijn: $x_k = x_{k'}$ met $k \neq k'$. In dit geval wordt het voorschrift (42) voor één van die twee betreffende basisvectoren voor k en k' vervangen worden door de vector B_k^T die voldoet aan:

$$B_{k\;k+1}^T = 1 \quad B_{k\;k'+1}^T = -1 \quad B_{ki}^T = 0\; \forall i \neq k+1, k'+1 \tag{45}$$

Het maakt hierbij niet uit welke k wordt uitgekozen om deze vervanging toe te passen. Als er meer dan twee waarden voor k zijn waarvoor de x_k gelijk zijn, wordt ook daarvoor dezelfde vervanging toegepast.

4 voorbeelden

4.1 volledige matrix

Ter illustratie van het stappenproces uit sectie 2.1 wordt een voorbeeld gegeven van een 4×4 tabel. De inputs zijn $\{2, 5.5, 9, 7.5\}$ en de outputs zijn $\{4.5, 8.5, 6, 5\}$. In matrix vorm:

$$\begin{pmatrix} 4.5 \\ 8.5 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & w_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 5.5 \\ 9 \\ 7.5 \end{pmatrix} \tag{46}$$

Het is eenvoudig na te gaan dat $\overline{x} = \overline{y} = 6$ en $\sigma_x^2 = 6.875$.

Gebruikmakend van vgl. (13) volgt hieruit volgt dat $\alpha \approx 0.11818$ en dus is de 1^e-orde benadering voor W:

$$\begin{pmatrix} 0.33864 & 0.22046 & 0.22046 & 0.22046 \\ 0.22046 & 0.33864 & 0.22046 & 0.22046 \\ 0.22046 & 0.22046 & 0.33864 & 0.22046 \\ 0.22046 & 0.22046 & 0.22046 & 0.33864 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 5.5 \\ 7 \\ 9.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.52727 \\ 5.94091 \\ 6.35455 \\ 6.17727 \end{pmatrix} \tag{47}$$

Voor het uitvoeren van stap 2 moeten met vgl. (14) $\tilde{x}$ en $\tilde{y}$ bepaald worden:

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} -4 \\ -0.5 \\ 3 \\ 1.5 \end{pmatrix} \qquad \tilde{y} = \begin{pmatrix} -1.02727 \\ 2.55909 \\ -0.35455 \\ -1.17727 \end{pmatrix} \tag{48}$$

Vervolgens worden in stap 3 met vgl. (15) de rijen van E bepaald:

$$E = \begin{pmatrix} 0.149421 & 0.018678 & -0.112066 & -0.056033 \\ -0.372231 & -0.046529 & 0.279174 & 0.139587 \\ 0.051570 & 0.006446 & -0.038678 & -0.019339 \\ 0.171240 & 0.021405 & -0.128430 & -0.064215 \end{pmatrix} \tag{49}$$

waarmee de matrix W wordt aangepast:

$$\begin{pmatrix} 0.488058 & 0.239132 & 0.108388 & 0.164421 \\ -0.151777 & 0.292107 & 0.499628 & 0.360041 \\ 0.272025 & 0.226901 & 0.299959 & 0.201116 \\ 0.391694 & 0.241860 & 0.092025 & 0.274421 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 5.5 \\ 9 \\ 7.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4.5 \\ 8.5 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix} \tag{50}$$

waarvoor ook geldt dat:

$$\begin{pmatrix} 0.488058 & 0.239132 & 0.108388 & 0.164421 \\ -0.151777 & 0.292107 & 0.499628 & 0.360041 \\ 0.272025 & 0.226901 & 0.299959 & 0.201116 \\ 0.391694 & 0.241860 & 0.092025 & 0.274421 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{51}$$

In principe is hiermee het proces om een **mogelijke** oplossing voor W te bepalen voltooid.

De alternatieve constructie uit sectie 2.3 leidt tot de matrix:

$$\begin{pmatrix} 0.666667 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.666667 & 0 & 0 \\ 0.151515 & 0.151515 & 1 & 0 \\ 0.181818 & 0.181818 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9 \\ 7.5 \\ 2 \\ 5.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 5 \\ 4.5 \\ 8.5 \end{pmatrix} \tag{52}$$

waarbij in de sorteringsprocedure de eerste twee rijen en de laatste twee rijen zijn omgewisseld. De som van de elementen voor iedere rij is evident niet gelijk aan 1 maar wel de som over de kolommen zoals voor deze constructie werd gevraagd. Omvormen met behulp van de matrix V (vgl. (25)) ledit tot:

$$\begin{pmatrix} 1.5 & 0 & -0.22727 & -0.27273 \\ 0 & 1.5 & -0.22727 & -0.27273 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9 \\ 7.5 \\ 2 \\ 5.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11.54545 \\ 9.295455 \\ 2 \\ 5.5 \end{pmatrix} \tag{53}$$

Deze combinatie voldoet evident aan vgl. (3).

De laatste stap is om de $N-2=2$ vectoren te bepalen die als basis-vector dienen voor de nulruimte, dwz. iedere lineaire combinatie van deze twee vectoren kan opgeteld worden bij willekeurig welke van de rijen van W, zonder dat dit verder de vergelijkingen (50) en (51) beïnvloedt. De constructiestappen van sectie 3 volgend betekent dit dat ofwel $k=2$ ofwel $k=4$, aangezien index $b=1$ en index $t=3$:

$$\begin{gathered} B_2 = \frac{1}{7.106335} \begin{pmatrix} -3.5 \\ 7 \\ -3.5 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.492518 \\ 0.985037 \\ -0.492518 \\ 0 \end{pmatrix} \\ B_4 = \frac{1}{7.382412} \begin{pmatrix} -1.5 \\ 0 \\ -5.5 \\ 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.203186 \\ 0 \\ -0.745014 \\ 0.948200 \end{pmatrix} \end{gathered} \tag{54}$$

Een even geldige keuze is bijvoorbeeld de volgende lineaire combinatie van deze vectoren:

$$\begin{gathered} B_1' = \frac{-0.492518B_2 - 0.203186B_4}{0.532784} = \begin{pmatrix} 0.532784 \\ -0.910592 \\ 0.739419 \\ -0.361611 \end{pmatrix} \\ B_2' = \frac{0.203186B_2 - 0.492518B_4}{0.532784} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.375659 \\ 0.500879 \\ -0.876539 \end{pmatrix} \end{gathered} \tag{55}$$

In vergelijking (50) valt op dat element $w_{21} < 0$. Hoewel dit niet in ieder geval een probleem hoeft te zijn, kan het voorkomen dat er een beperking geldt dat ieder element van W groter dan of gelijk aan 0 moet zijn. Als in dit voorbeeld deze eis opgelegd zou moeten worden, is het dus nodig om verder te corrigeren, daarbij gebruikmakend van een B vector, of een lineaire combinatie van de B vectoren. Als bijvoorbeeld $0.303644B_1'$ bij de tweede rij van W wordt opgeteld is het resultaat:

$$\begin{pmatrix} 0.488058 & 0.239132 & 0.108388 & 0.164421 \\ 0.01 & 0.015611 & 0.724148 & 0.250240 \\ 0.272025 & 0.226901 & 0.299959 & 0.201116 \\ 0.391694 & 0.241860 & 0.092025 & 0.274421 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 5.5 \\ 9 \\ 7.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4.5 \\ 8.5 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix} \tag{56}$$

waarvoor ook nog steeds geldt dat $W \cdot 1 = 1$. Het is duidelijk dat nu alle elementen van W voldoen aan de vereiste om ≥ 0 te zijn.

4.2 geblokte matrix

Voor het geval van de geblokte matrix gebruiken we een 5×5 tabel, waarbij verondersteld wordt dat stap (29) alvast is uitgevoerd. De inputs zijn $\{20, 70, 30, 60, 40\}$ en de outputs zijn $\{30, 25, 45, 20, 100\}$. Gebruikmakend van (32) wordt dit in matrix vorm:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0.3 & 0.3 \\ 0 & 0 & 0 & 0.25 & 0.25 \\ 0 & 0 & 0 & 0.45 & 0.45 \\ 0.166667 & 0.166667 & 0.166667 & 0 & 0 \\ 0.833333 & 0.833333 & 0.833333 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 20 \\ 70 \\ 30 \\ 60 \\ 40 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 30 \\ 25 \\ 45 \\ 20 \\ 100 \end{pmatrix} \tag{57}$$

Als nu bijvoorbeeld $\epsilon = 0.25$ gekozen wordt in (35) en (36) dan wordt:

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 14,01375 & -1,08625 & -4,68625 & -4,47125 & -0,47125 \\ -1,08625 & 15,81375 & -3,78625 & -4,77125 & -0,77125 \\ -4,68625 & -3,78625 & 8,61375 & -3,57125 & 0,42875 \\ -4,47125 & -4,77125 & -3,57125 & 25,42375 & -2,57625 \\ -0,47125 & -0,77125 & 0,42875 & -2,57625 & 1,42375 \end{pmatrix} \tag{58}$$

en dit probleem is omgevormd naar:

$$\begin{pmatrix} 2.65 & -1.125 & -2.025 & 0.25 & 1.25 \\ -1.35 & 2.875 & -2.025 & 0.25 & 1.25 \\ -1.35 & -1.125 & 1.975 & 0.25 & 1.25 \\ 0.45 & 0.375 & 0.675 & 3.25 & -3.75 \\ 0.45 & 0.375 & 0.675 & -0.75 & 0.25 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 20 \\ 70 \\ 30 \\ 60 \\ 40 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -21.5 \\ 178.5 \\ 18.5 \\ 100.5 \\ 20.5 \end{pmatrix} \tag{59}$$

Dit voldoet aan vgl. (39) en de toegestane aanpassingen die randtotalen intact houden kunnen ook weer terug getransformeerd worden naar de oorspronkelijke variabelen.

5 Het toevoegen van extra voorwaarden

Iedere extra voorwaarde die opgelegd moet worden aan het binnenwerk van de tabel moet worden vertaald naar een voorschrift voor lineaire coëfficiënten voor de set van basisvectoren die in sectie 2.3 is opgesteld. Voor iedere rij van de tabel, met N elementen, zijn er $N - 2$

basisvectoren. Zoals is vermeld in sectie 2.3 kan er nooit maar 1 cel op een bepaalde rij worden aangepast, als alle randtotalen gelijk moeten blijven. Alleen in speciale omstandigheden is het mogelijk om slechts 2 cellen aan te passen, en meestal zullen er 3 cellen tegelijkertijd moeten worden gewijzigd.

5.1 harde voorwaarden

Wanneer op een bepaalde cel W_{ji} een harde voorwaarde van toepassing is, wordt hiermee bedoeld dat:

$$W_{ji} \equiv c \tag{60}$$

waarbij c een bekende waarde is. Er kunnen maximaal $N-2$ van dit soort voorwaarden bestaan, aangezien anders het aantal beschikbare vrijheidsgraden wordt overschreden. In dat geval heeft het probleem alleen onder speciale omstandigheden nog een oplossing. Bij precies $N-2$ voorwaarden is er een unieke oplossing die echter veel sneller gevonden kan worden dan door toepassing van de hier beschreven methoden, nl. direct invullen. In wat volgt wordt alleen de situatie beschreven waarbij er (veel) minder dan $N-2$ harde voorwaarden zijn voor een bepaalde rij van de matrix W. Bij $n < N-2$ voorwaarden geldt:

$$W_{ji_l} \equiv c_l \quad l = 1, \dots, n \quad 2 \le i_l \le N-1 \tag{61}$$

De i_l zijn dus die indices van de elementen van W waarvoor een harde voorwaarde geldt.

Het eenvoudigste te behandelen is het geval waarbij geen van de harde voorwaarden de elementen W_{j1} of W_{jN} betreffen, na herordening zoals beschreven in sectie 2.3. In dit geval wordt de rij-vector W_j aangepast door te subsitueren:

$$W_{ji} \leftarrow W_{ji} + \sum_{l=1}^{n} \frac{c_l - W_{ji_l}}{B^T_{i_l-1\ i_l}} B^T_{i_l-1\ i} \quad \forall\ i = 1, \dots, N \tag{62}$$

Wanneer er voor W_{j1} en/of W_{jN} wel een harde voorwaarde geldt, is er een extra handeling nodig omdat de set van basisvectoren zoals opgebouwd door vgl. (42) altijd het eerste en laatste element $\neq 0$ hebben. Er moet dan eerst een alternatieve set van basisvectoren worden opgebouwd waarvoor het eerste element (cq. het laatste element) alleen maar $\neq 0$ is voor één van de vectoren, en $= 0$ voor alle andere vectoren in de set.

Wanneer voor W_{j1} een harde voorwaarde geldt moet de kleinste k gevonden worden, zodanig dat er voor W_{jk} **geen** harde voorwaarde geldt. Vervolgens wordt de set van basis rij-vectoren B^T_j vervangen door:

$$B^T_{j\ i} \leftarrow B^T_{j\ i} - \frac{B^T_{j\ 1}}{B^T_{k-1\ 1}} B^T_{k-1\ i} \quad \forall\ j = 1, \dots, (k-2), k, \dots, N-2 \quad \forall\, i = 1, N \tag{63}$$

Na deze substitutie geldt dat $B^T_{j1} = 0$ voor alle waarden van j behalve voor $j = k-1$. Vervolgens wordt de basis rijvector B^T_{k-1} gebruikt om W_j te wijzigen zodanig dat aan de harde voorwaarde voor W_{j1} wordt voldaan. Een vergelijkbare handeling wordt toegepast wanneer voor W_{jN} een harde voorwaarde geldt. In dit geval moet de grootste k gevonden worden, zodanig dat er voor W_{jk} **geen** harde voorwaarde geldt. Vervolgens wordt de set van basis rij-vectoren B^T_j vervangen door:

$$B^T_{j\ i} \leftarrow B^T_{j\ i} - \frac{B^T_{j\ 1}}{B^T_{k-1\ 1}} B^T_{k-1\ i} \quad \forall\ j = 1, \dots, (k-2), k, \dots, N-2 \quad \forall\, i = 1, N \tag{64}$$

Na deze substitutie geldt dat $B_{j1}^T = 0$ voor alle waarden van j behalve voor $j = k - 1$. Vervolgens wordt de basis rijvector B_{k-1}^T gebruikt om W_j te wijzigen zodanig dat aan de harde voorwaarde voor W_{jN} wordt voldaan.

In beide gevallen wordt, na deze subsitituties om tot een nieuwe set voor de B^T te komen, met die nieuwe set B^T de vgl. (62) toegepast voor de substitutie voor de rij W_j. Na deze subsituties zijn alle harde voorwaarden geïmplementeerd en worden de vectoren $B_{i_l-1\ i}^T$ voor alle l weg gehaald uit de basis set. Voor implementatie van iedere andere nog te stellen voorwaarde hierna zijn er dan nog $N - 2 - n$ basis rij-vectoren B_j^T over.

5.2 andere of zachte voorwaarden

Naast de voorwaarden zoals die in sectie 4.1 zijn beschreven, kunnen er voorwaarden zijn op celwaarden waarbij er onder- en bovengrenzen bestaan, zodanig dat:

$$w_{low\ ji} \le W_{ji} \le w_{high\ ji} \tag{65}$$

Deze onder- en bovengrenzen kunnen zelf hard zijn, dwz. met overschrijdingskans 0 of volgen uit een probabiliteits analyse waarbij er een meest waarschijnlijke waarde $\langle w \rangle_{ji}$ is voor de cel W_{ji}, met daar omheen een interval waarbij er een eindige, kleine, kans is op overschrijding van de onder- en bovengrens. Zoals in sectie 4.1 is beschreven kunnen er na de n harde voorwaarden nog hoogstens $N - 2 - n$ andere voorwaarden worden opgelegd.

De aanpak hier kan op een vergelijkbare manier geformuleerd worden als in sectie 4.1. Precies zoals is beschreven in sectie 4.1 moet eventueel een vervanging voor de basis-set worden geconstrueerd wanneer W_{j1} en/of W_{jN} bij deze voorwaarden betrokken zijn. In wat volgt wordt er van uit gegaan dat een dergelijke subsititutie, wanneer nodig, al is uitgevoerd. Een manier om dit soort voorwaarden toe te voegen is door in plaats van vgl. (61) toe te passen :

$$\begin{aligned} W_{ji_l} &\equiv c_l + z_{jl}\beta_l^- \qquad -1 \le z < 0 \quad l = 1, \dots, m \quad 2 \le i_l \le N-1 \\ &\equiv c_l + z_{jl}\beta_l^+ \qquad 0 \le z \le 1 \quad l = 1, \dots, m \quad 2 \le i_l \le N-1 \end{aligned} \tag{66}$$

waarbij voor m geldt $m < N - 2 - n$. Iedere waarde voor z in het aangegeven bereik is toegestaan. De waarde van c_l is in dit geval ofwel de hierboven beschreven meest waarschijnlijke waarde $\langle w \rangle_{j\ i_l}$, ofwel wordt aangenomen dat $\langle w \rangle_{j\ i_l} = (w_{low\ j\ i_l} + w_{high\ j\ i_l})/2$ wanneer niets anders bekend is. Voor de definities van de β wordt gebruikt:

$$\begin{aligned} \beta_l^- &\equiv \langle w \rangle_{j\ i_l} - w_{low\ j\ i_l} \\ \beta_l^+ &\equiv w_{high\ j\ i_l} - \langle w \rangle_{j\ i_l} \end{aligned} \tag{67}$$

hetgeen inhoudt dat een kleine overschrijdingskans wordt benaderd door deze expliciet op 0 te stellen. Door in vgl. (62) voor c_l te substitueren :

$$c_l \;\leftarrow\; \langle w \rangle_{j\ i_l} + z_{jl}\beta_l \tag{68}$$

worden de voorwaarden geïmplementeerd waarbij iedere z_{jl} onafhankelijk mag variëren tussen -1 en 1. Door al deze $z = 0$ te stellen wordt de meest waarschijnlijke oplossing voor W geconstrueerd.

Voor de z kunnen waarschijnlijkheidsverdelingen gepostuleerd worden, bijv. uniform of normaal verdeeld, of overgenomen worden uit inhoudelijke analyses. Zolang aangenomen mag worden dat deze z statistisch onafhankelijk zijn, is een gezamenlijke waarschijnlijkheidsverdeling voor alle

z ook eenvoudig te bepalen. Hiermee is een gevoeligheidsanalyse van de gehele matrix W, consistent met alle voorwaarden, uit te voeren.

6 Conclusie

Bij het opbouwen van bijvoorbeeld I/O tabellen uit incomplete informatie is een pragmatische aanpak om vanuit bekend veronderstelde rand-totalen een binnenwerk op te bouwen dat altijd aan deze rand-totalen voldoet. Een expliciete constructie-procedure van dit binnenwerk wordt gegeven in dit rapport. Een bijkomend voordeel van deze constructie-procedure is dat additionele harde en zachte voorwaarden op elementen uit het binnenwerk onafhankelijk van elkaar in rekening gebracht kunnen worden zolang het verschillende output rijen betreft. In het hier gepresenteerde proces worden bovendien alle dergelijke aanpassingen zodanig gedaan, dat expliciet aan alle randtotalen blijft worden voldaan.

Het verdient aanbeveling de betreffende constructie-stappen te implementeren, bijvoorbeeld in R, en voor user-tests aan te bieden aan eindgebruikers. Het is daarbij het overwegen waard om ook een GUI beschikbaar te maken waarmee de exploratie van de resterende vrijheidsgraden zo gebruiksvriendelijk als mogelijk kan worden uitgevoerd.

Met dank aan Leon Willenborg voor stimulerende discussies die hebben geleid tot een verbreding van het model.

References

Willenborg, L. (2017). Mass redistribution. Technical report.

Publisher
Statistics Netherlands
Henri Faasdreef 312, 2492 JP The Hague
www.cbs.nl

Prepress: Statistics Netherlands, Grafimedia
Design: Edenspiekermann

Information
Telephone +31 88 570 70 70, fax +31 70 337 59 94
Via contact form: www.cbs.nl/information

Where to order
verkoop@cbs.nl
Fax +31 45 570 62 68
ISSN 1572-0314