Overdruk uit het Landbouwkundig Tijdschrift
77ste jaargang nr. 21, december 1965

Gebruik van veeltermen bij het continu maken van functies

J. T. N. VENEKAMP

Een eenvoudig verband tussen twee grootheden wordt vaak weergegeven als een veelterm van lage graad. Een dergelijke veelterm moet in de regel niet worden opgevat als de juiste formule, maar als een praktische benadering die voldoet.
In het volgende wordt de aandacht gevraagd voor twee verschillende punten die te maken hebben met de overgang in de continue functie van een rij getallen, zoals deze overgang binnen de vorm van de veelterm mogelijk is. Eerst wordt een oude handige interpolatieformule behandeld; daarna wordt ingegaan op de gevolgen van het verschil tussen orthogonale vectoren en orthogonale continue functies (functievectoren) bij polynomen.

INTERPOLATIEFORMULE VAN GREGORY-NEWTON

Als een astronoom op de tijdstippen $x_0, x_1, x_2 \ldots\ldots\ldots x_m$ een eigenschap van een ster heeft gemeten met als resultaten $y_0, y_1, y_2 \ldots\ldots\ldots y_m$, dan beschikt hij over de punten (x_i, y_i) die hij moet generaliseren tot een eenduidige continue functie $y = f(x)$. Een onderzoeker die opbrengsten bij bemestingstrappen waarneemt, verkeert in een overeenkomstige situatie. Als functie kiest hij misschien een veelterm.
Als men in het algemeen door $m+1$ punten (x_i, y_i) $i = 0, 1, 2, \ldots m$ een veelterm wil berekenen van de vorm $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 \ldots\ldots + a_mx^m$, kan men de coëfficiënten $a_0, a_1, a_2 \ldots\ldots\ldots a_m$ verkrijgen door $m+1$ simultane vergelijkingen op te lossen.
Soms is er een handiger methode. Als de waarden van x equidistant zijn, d.w.z. als $(x_{i+1} - x_i)$ constant is, kunnen de waarden $x_0, x_1, x_2 \ldots\ldots\ldots x_m$ door een eenvoudige schaalverandering getransformeerd worden tot $x = 0, 1, 2 \ldots\ldots m$. Hierna kan men de interpolatieformule van Gregory-Newton toepassen (1).

Deze luidt:

$$y_x = y_0 + \frac{x^{[1]}}{1!} \Delta y_0 + \frac{x^{[2]}}{2!} \Delta^2 y_0 \ldots\ldots + \frac{x^{[m]}}{m!} \Delta^m y_0 \qquad (1)$$

In deze formule staan de factoriële momenten:

$$x^{[1]} = x$$
$$x^{[2]} = x(x-1)$$
$$x^{[3]} = x(x-1)(x-2)$$

enz.

en de differenties: $\triangle\ y_0 = y_1 - y_0$
$\triangle\ ^2y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0$
$\triangle\ ^3y_0 = y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0$

Formule (1) uit de differentierekening komt overeen met de formule van Taylor uit de differentiaalrekening:

$$f(x) = f(0) + \frac{x}{1!} f'(0) + \frac{x^2}{1!} f''(0) \ldots\ldots \tag{2}$$

waarin $f'(0)$, $f''(0)$ .... differentialen voorstellen bij $x = 0$.

a. Bewijs dat de coëfficiënten van formule (1) goed zijn

Er bestaat een formele overeenkomst tussen het differentiëren in de differentialarekening en het nemen van differenties in de differentierekening. Zo geldt bijvoorbeeld naast

$$z_k = \frac{x^k}{k!} \longrightarrow z_k' = \frac{x^{k-1}}{(k-1)!} \quad \text{in de differentiaalrekening}$$

$$z_k = \frac{x^{[k]}}{k!} \longrightarrow \triangle z_k = \frac{x^{[k-1]}}{(k-1)!} \quad \text{in de differentierekening}$$

Uitgaande van een formule met de onbekende coëfficiënten $a_0, a_1, a_2 \ldots a_m$:

$$y_x = a_0 + \frac{x^{[1]}}{1!} a_1 + \frac{x^{[2]}}{2!} a_2 \ldots\ldots + \frac{x^{[m]}}{m!} a_m \tag{3}$$

volgt als eerste differentie hiervan:

$$\triangle y_x = 0 + a_1 + \frac{x^{[1]}}{1!} a_2 \ldots\ldots + \frac{x^{[m-1]}}{(m-1)!} a_m \tag{4}$$

Hierin geeft $x = 0$ als uitkomst $\triangle y_0 = a_1$

Zo kan ook worden bewezen dat $\triangle^2 y_0 = a_2$ enz.

b. Tweede bewijs

Voor degenen die liever met matrices werken, volgt hier een andere afleiding. Voor het gemak wordt $m = 3$ genomen.

Uitschrijven van $\frac{x^{[0]}}{0!}, \frac{x^{[1]}}{1!}, \frac{x^{[2]}}{2!}, \frac{x^{[3]}}{3!}$ bij $x = 0, 1, 2, 3$ geeft:

x	$\frac{x^{[0]}}{0!}$	$\frac{x^{[1]}}{1!}$	$\frac{x^{[2]}}{2!}$	$\frac{x^{[3]}}{3!}$
0	1	0	0	0
1	1	1	0	0
2	1	2	1	0
3	1	3	3	1

dus:

$$\begin{matrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{matrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{matrix} \quad \text{is een andere schrijfwijze voor formule} \qquad (3)$$

De transformatie nodig om de waarden van a_0, a_1, a_2, a_3 op te lossen, vindt plaats met behulp van de reciproke matrix. Vermenigvuldiging van linker- en rechterlid met deze reciprook geeft:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & -3 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{matrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{matrix}$$

of:

$$\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 - y_0 \\ y_2 - 2y_1 + y_0 \\ y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0 \end{bmatrix} \text{ of } \begin{matrix} y_0 \\ \Delta y_0 \\ \Delta^2 y_0 \\ \Delta^3 y_0 \end{matrix} = \begin{matrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{matrix}$$

Toepassing

Welke veelterm behoort bij de waargenomen waarden $y_x = -1, +1, -1, +1$ als $x = 0, 1, 2, 3$?

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
0	$\boxed{-1}$	$\boxed{+2}$	$\boxed{-4}$	$\boxed{+8}$
1	+1	−2	+4	
2	−1	+2		
3	+1			

Bij invulling van de waarden in formule (1) krijgt men:

$$y = -1 + 2\frac{x}{1!} - \frac{4\,x\,(x-1)}{2!} + \frac{8\,x\,(x-1)\,(x-2)}{3!} \quad \text{of}$$

$$y = -1 + 6\tfrac{2}{3}\,x - 6\,x^2 + 1\tfrac{1}{3}\,x^3$$

OPMERKINGEN OVER ORTHONORMALE VECTOREN EN CONTINUE FUNCTIES BIJ POLYNOMEN

Orthogonale polynomen van Tchebycheff

Als in de regressierekening (y_i) | $(i = 1, 2, 3, 4)$ verklaard wordt door (1), (x_i), (x_i^2), ontstaat een regressievergelijking:

$$(\overline{y_i}) = a_0\,(1) + a_1\,(x_i) + a_2\,(x_i^2) \qquad (5)$$

De vectoren (1), (x_i), (x_i^2) vormen een basis (3) in een driedimensionale lineaire vectorruimte. De vector $(\overline{y_i})$ ligt in deze ruimte. Een keuze van een andere basis in dezelfde ruimte door een lineaire transformatie van (1), (x_i), (x_i^2) tot een nieuw stel lineaire onafhankelijke basisvectoren heeft geen invloed op $(\overline{y_i})$.

De grote vrijheid van keuze van basisvectoren binnen de regressieruimte geeft gelegenheid om een handige, liefst orthogonale basis te kiezen. Men neme bijv. vectoren die behoren bij de orthogonale polynomen van Tchebycheff (1, 4):

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{\sqrt{20}} & +\frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{20}} & -\frac{1}{2} & +\frac{3}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{2} & +\frac{1}{\sqrt{20}} & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{2} & +\frac{3}{\sqrt{20}} & +\frac{1}{2} & +\frac{1}{\sqrt{20}} \end{bmatrix} \quad \text{of in de gebruikelijke notatie} \quad [\xi'_0, \xi'_1, \xi'_2\ \xi'_3] \tag{4}$$

Formule (5) mag volgens het bovenstaande getransformeerd worden tot een vergelijking, waarin deze vectoren zijn opgenomen:

$$(\bar{y}_i) = b_0 \xi_0 + b_1\, \xi'_1 + b_2\, \xi'_2 \tag{6}$$

In de praktijk begint men met (6) te berekenen, voert deze tot (5) terug en generaliseert over een zeker gesloten gebied van x tot

$$\bar{y} = a_0 + a_1\, x + a_2 x^2$$

Als aangenomen wordt dat bij i = 1, 2, 3, 4 de waarden van x_i zijn: $= 1\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +1\frac{1}{2}$, bestaat het volgende verband tussen de vectoren van Tchebycheff en de veeltermen:

$$\xi_0 = \frac{1}{2}(1),\ \xi'_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}(x_i),\ \xi'_2 = \frac{1}{2}(x_i^2) - \frac{5}{8}(1),\ \xi'_3 = \frac{\sqrt{5}}{3}(x_i^3) - \frac{41\sqrt{5}}{60}(x_i)$$

Orthonormale vectoren en orthonormale continue functies *

Bovenstaande vectoren staan in de vorm van veeltermen. Deze veeltermen kunnen worden aangeduid met:

$$P_0 = \frac{1}{2},\ P_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}x,\ P_2 = \frac{1}{2}x^2 - \frac{5}{8},\ P_3 = \frac{\sqrt{5}}{3}x^3 - \frac{41\sqrt{5}}{60}x$$

In deze notatie is opzettelijk de beperking in de mogelijke waarden van x weggelaten. Als bovenstaande veeltermen worden beschouwd als continue functies op een bepaald interval van x, zal het nodig zijn bij $x = -1\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +1\frac{1}{2}$ aan de functiewaarden een gewicht één toe te kennen en

* Strikt genomen is de uitdrukking orthonormale continue functie niet juist. Orthonormaliteit slaat steeds op vectoren. De term wordt hier gebruikt, omdat men ook spreekt van orthogonale polynomen.

bij alle andere waarden van x een gewicht nul, als men P_0, P_1, P_2 en P_3 gelijkwaardig wil laten zijn aan ξ_0, ξ'_1, ξ'_2 en ξ'_3.
Met de meer voor de hand liggende opvatting dat de continue functies P_i een gelijkmatige dichtheid zullen hebben over het continue en begrensde gebied van x, mist men de aansluiting bij de orthogonale vectoren volgens Tchebycheff, zoals uit het volgende zal blijken. Orthonormaliteit van vectoren kan men in het algemeen niet op de bijbehorende continue veeltermen overdragen.

Definiëring van orthonormaliteit bij continue functies

Terwijl men bij vectoren de orthogonaliteit en de normering vastlegt door

$$\Sigma x_i x_j = \delta_{ij} \begin{cases} \delta_{ij} = 1 \text{ als } i = j \\ \delta_{ij} = 0 \text{ als } i = j \end{cases}$$

ligt het voor de hand bij continue functies integralen te kiezen in plaats van sommen. Men doet alsof er over een gesloten interval een oneindig aftelbaar aantal punten x_i zijn, die homogeen over dit interval zijn verdeeld. De orthogonalisering en normering definieert men door $\int_a^b P_i P_j \, dx = \delta_{ij}$, waarin P_i en P_j veeltermen in x van de i^e resp. j^e graad zijn.
Hiermede wordt de gewone vectorruimte verlaten. Thans is het mogelijk te werken in een functievectorruimte (Hilbert-ruimte), waarin functievectoren de basis vormen (6).
Deze basisvectoren kan men opvatten als genormeerde vectoren met oneindig veel elementen; zie verder Synge (6).

Legendre-polynomen

Als men het bovenstaande orthonormalisatieproces volgt, begint men natuurlijk met de veelterm van de laagste graad P_0. Elke volgende veelterm die men in het proces betrekt, is een graad hoger. Het resultaat is afhankelijk van de grenzen a en b van het integratiegebied van x. Kiest men $a = -\frac{1}{2}$ en $b = +\frac{1}{2}$ als grenzen van het integratiegebied, dan verkrijgt men als functievectoren juist de gewone orthogonale polynomen van Legendre. Er bestaan formules (2, 5) waaruit is af te leiden, dat men bij keuze van $-a \leqslant x \leqslant +a$ als gesloten interval en na normering komt tot de algemene formule:

$$P_k = \sqrt{\frac{2k+1}{2a}} \, \frac{1}{k!} \, \frac{d^k \left\{ \left[\left(\frac{x}{a}\right)^2 - 1 \right]^k \right\}}{d_x^k} \tag{7}$$

Om aan te sluiten bij het voorgaande waarin $x = -1\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +1\frac{1}{2}$ gekozen werd, zou men als interval $-2 \leqslant x \leqslant +2$ kunnen nemen.
Toepassing van formule (7) is nu mogelijk, maar rechtstreekse toepassing van het orthonormalisatieproces ligt voor de hand.

$$\text{Uit} \int_{-2}^{+2} (P_0)^2 dx = 1 \text{ volgt } P_0 = \frac{1}{2}$$

$$\text{Uit} \int_{-2}^{+2} P_0 P_1 dx \text{ en } \int_{-2}^{+2} (P_1)^2\, dx = 1 \text{ volgt } P_1 = \frac{1}{4}\sqrt{3}x$$

enz.

Naast (Tchebycheff)	wordt gevonden (Legendre)
$\xi_0 = \frac{1}{2}(1)$	$P_0 = \frac{1}{2}$
$\xi_1' = \frac{1}{\sqrt{5}}(x_i)$	$P_1 = \frac{1}{4}\sqrt{3}x$
$\xi_2' = \frac{1}{2}(x_i^2) - \frac{5}{8}(1)$	$P_2 = \frac{3}{16}\sqrt{5}x^2 - \frac{1}{4}\sqrt{5}$
$\xi_3' = \frac{\sqrt{5}}{3}(x_i^3) - \frac{41\sqrt{5}}{60}(x_i)$	$P_3 = \frac{5}{32}\sqrt{7}x^3 - \frac{3}{8}\sqrt{7}x$
$(x_i = -1\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +1\frac{1}{2})$	$(-2 \leqslant x \leqslant +2)$

Als we de bovenstaande veeltermen vergelijken (onder verwaarlozing van de discontinuïteit bij Tchebycheff), blijken de verschillende orthogonalisatiemethoden tot verschillende uitkomsten te leiden. Dit blijkt verder ook bij vergelijking van de vectoren (de discontinuïteit is nu ook bij Legendre ingevoerd).

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{\sqrt{20}} & +\frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{20}} & -\frac{1}{2} & +\frac{3}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{2} & +\frac{1}{\sqrt{20}} & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{\sqrt{20}} \\ \frac{1}{2} & +\frac{3}{\sqrt{20}} & +\frac{1}{2} & +\frac{1}{\sqrt{20}} \end{bmatrix} \text{ tegenover } \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{8}\sqrt{3} & +\frac{11}{64}\sqrt{5} & +\frac{9}{256}\sqrt{7} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{8}\sqrt{3} & -\frac{13}{64}\sqrt{5} & +\frac{43}{256}\sqrt{7} \\ \frac{1}{2} & +\frac{1}{8}\sqrt{3} & -\frac{13}{64}\sqrt{5} & -\frac{43}{256}\sqrt{7} \\ \frac{1}{2} & +\frac{3}{8}\sqrt{3} & +\frac{11}{64}\sqrt{5} & -\frac{9}{256}\sqrt{7} \end{bmatrix}$$

Voorbeeld ter toelichting

Stel dat bij $(x_i) = -1\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +1\frac{1}{2}$ werd waargenomen $(y_i) = -71, -2, +6, +43$. Gevraagd wordt de regressievergelijking van de tweede graad.

a. Volgens de gewone regressieanalyse of met behulp van de methode van Tchebycheff wordt als vector van beste schattingen gevonden $(\bar{y}_i) = -66{,}5, -15{,}5, +19{,}5, +38{,}5$. De bijbehorende continue functie is $y = 4 + 35x - 8x^2$.

b. Volgens de methode van Legendre worden de waarnemingen eerst van toepassing verklaard op het gebied $-2 \leqslant x \leqslant +2$. Gevonden wordt dat de waarnemingen van x en y voldoen aan $y = 4 + 4\frac{1}{4}x - 8x^2 + 15x^3$.

Er wordt een tweedegraads regressievergelijking gevraagd. Deze wordt verkregen door het aandeel van $P_3 = \frac{5}{32}\sqrt{7}\,x^3 - \frac{3}{8}\sqrt{7}\,x$ als orthogonale foutcomponent van $y = 4 + 4\frac{1}{4}x - 8x^2 + 15x^3$ af te splitsen.

De vergelijking bevat $\frac{15 \times 32}{5\sqrt{7}}\,P_3$.

Na zuivering van deze fout krijgt men:

$y = 4 + 40\frac{1}{4}x - 8x^2$.

De schattingen voor $(\bar{y}_i)$ zijn dan: $-74\frac{3}{8}, -18\frac{1}{8}, +22\frac{1}{8}, +46\frac{3}{8}$

Hier blijkt duidelijk dat eerst de regressie bepalen en daarna continu maken een ander resultaat geeft dan eerst continu maken en daarna regressie bepalen.

SLOTOPMERKING

Het is niet de bedoeling geweest om het gebruik van gewone orthogonale polynomen af te raden. Wel is bedoeld te waarschuwen tegen de gedachte, dat als bij vectoren een splitsing in onafhankelijke (orthogonale) delen goed verloopt, dit bij continue functies net zo zal zijn.

SUMMARY

Use of polynomials in making functions continuous

In the first part the use of the old Gregory-Newton interpolation formula in curve-fitting is demonstrated.

A polynomial function $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 \ldots\ldots a_mx^m$ can be calculated given $y_0, y_1, y_2 \ldots\ldots y_m$ at equidistant values of x by means of descending factorial moments and difference-quotients.

In the second part attention is paid to the difference between orthogonal vectors and orthogonal continuous functions or function-vectors. Tchebycheff and Legendre polynomials are compared.

Orthogonality of the vectors does not imply orthogonality of the statisfying continuous polynomial functions, neither does the orthogonality of polynomial functions warrant the orthogonality of the vectors included.

LITERATUUR / *REFERENCES*

1 Aitken, A. C.: Statistical mathematics. Oliver and Boyd, London 1957, p. 146.
2 Byerly, W. C.: An elementary treatise on Fourier's series. Dover Publ., New York 1959, p. 160.
3 Corsten, L. C. A.: Vectors a tool in statistical regression theory. Veenman & Zonen, Wageningen 1957, p. 9.
4 Fisher, R. A. & Yates, F.: Statistical tables, 6th ed. Oliver and Boyd, London 1963, p. 33.
5 Kendall, M. G. & Stuart, A.: The advanced theory of statistics II. Charles Griffin & Comp. Ltd., London 1961, p. 444.
6 Synge, J. L.: The hypercircle in mathematical physics. Cambridge University Press, 1959, p. 55.