

Het vereffenen van een formule voor de pF-curve

ir. Ph. Th. Stol

Gegeven is de empirische formule

$$b(pF) = a + (1-p) \log \frac{P-v}{P-C} - p \log \frac{v-C}{P-C} \quad (1)$$

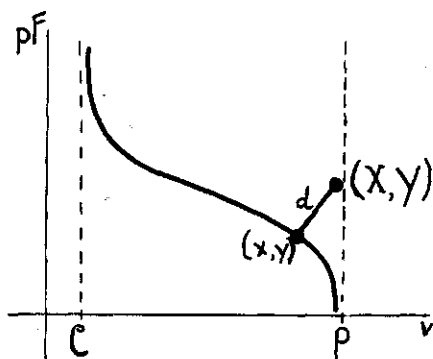
welke met $pF = y$ en $v = x$ in expliciete vorm luidt:

$$y = \frac{a}{b} + \frac{1-p}{b} \log \frac{P-x}{P-C} - \frac{p}{b} \log \frac{x-C}{P-C} \quad (2)$$

of, in de uitgangsvorm voor de vereffeningprocedure

$$F(x, y; a, b, p, C, P) = by - a - (1-p) \log \frac{P-x}{P-C} + p \log \frac{x-C}{P-C} = 0 \quad (3)$$

De benaderingsmethode bij de vereffening, waarbij de partiële afgeleiden ontwikkeld worden naar de waarnemingen (X, Y), blijkt op de gegeven functie



niet toegepast te kunnen worden. De bezwaren zijn van tweeërlei aard. In de eerste plaats kan de kromming van de curve plaatselijk zo groot zijn, dat de gebruikelijke ontwikkeling volgens Taylor geen voldoende benadering meer geeft. Het tweede bezwaar vloeit voort uit het feit dat de ligging van de asymptoten (bepaald door de constanten C en P) door middel van de vereffening moet worden bepaald.

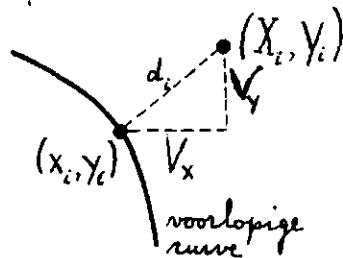
Het kan hierbij voorkomen dat de uit de eerste iteratie gevonden correctie op de geschatte waarde van C resp. P zodanig is dat de tweede iteratie begonnen wordt met een functie, waarvan een of meer gegevens (X_i, Y_i) in het imaginaire gebied liggen. In deze gevallen is de

1787092

ontwikkeling van de partiële afgeleiden, met name die van F_p (zie (2)) en de berekening van $F(X_i, Y_i) = F_0$, zelfs onmogelijk.

Om aan de genoemde bezwaren tegemoet te komen, moet van deze wijze van benaderen worden afgezien en moeten de partiële afgeleiden ontwikkeld worden naar de vereffende punten (\bar{x}, \bar{y}) . Uiteraard zijn deze punten niet bekend, doch deze kunnen vervangen worden door de punten (x, y) van een voorlopige curve. Deze wordt weer verkregen uit een schatting van de parameters. Geeft deze schatting een voldoende benadering van de vereffende waarden, dan is het verschil $(x - \bar{x})$ en $(y - \bar{y})$ klein.

Stel dat de vereffening plaatsvindt in de richting



$$\frac{V_y}{V_x} = \frac{w_x}{w_y} \quad \frac{F_y}{F_x} = - \frac{w_x}{w_y} \frac{dx}{dy}$$

waarin w_x en w_y de gewichten zijn van het punt (X, Y) .

De vergelijking van de lijn door (X, Y) , waarlangs de afstand d gemeten moet worden, is dan voor het punt met index i

$$(Y - Y_i) = - \left(\frac{w_x}{w_y} \frac{1}{y'} \right)_i (x - X_i) \quad (4)$$

Hierin zal $\frac{w_x}{w_y}$ veelal een constante verhouding zijn. De afgeleide y' moet berekend worden voor het punt (x_i, y_i) . Dit punt is echter zonder meer niet bekend. In principe zou de volgende oplossing gevolgd kunnen worden:

$$y' = f'(x) \quad \text{en} \quad y = f(x)$$

Uit deze vergelijkingen kunnen x en y opgelost worden tot

$$x = f_1(y') \quad y = f_2(y') \quad (5)$$

Substitutie in (4) geeft dan

$$f_2(y') - Y_i = - \left(\frac{w_x}{w_y} \frac{1}{y'} \right) \left\{ f_1(y') - X_i \right\} \quad (6)$$

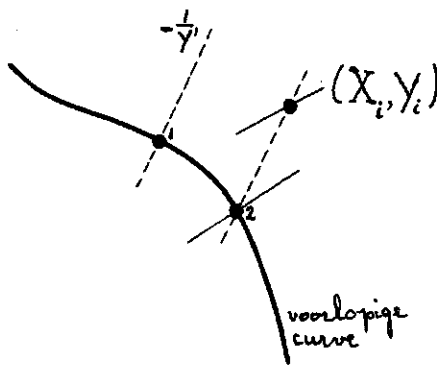
waaruit een waarde voor y' berekend zou kunnen worden. Hiermede is dan de rechte (n) bepaald en kan uit snijding met de curve (2) het punt (x_i, y_i) gevonden worden.

Deze bewerking zal over het algemeen op moeilijkheden stuiten indien de functies f_1 en f_2 uit (5) een ingewikkelde vorm hebben. Voor (2) wordt bij voorbeeld verkregen:

$$y' = \frac{(1-p)}{b} \frac{0,4343}{P-x} - \frac{p}{b} \frac{0,4343}{x-C}$$

Hieruit moet x opgelost worden, waarmee f_1 verkregen is. Substitutie van x in (2) geeft dan de functie f_2 , terwijl tenslotte de uitkomsten in (6) moeten worden ingebracht, waaruit dan y' berekend moet worden.

Een andere berekeningswijze van de punten (x_i, y_i) kan wellicht gemakkelijker tot het doel voeren. Hiertoe wordt de afgeleide y' berekend voor een punt (x_1, y_1) op de voorlopige curve in de omgeving van (X_i, Y_i) . Met deze afgeleide wordt de rechte (4) bepaald, gaande door het punt (X_i, Y_i) . Deze rechte snijdt de voorlopige curve in het punt 2, voor welk punt opnieuw de afgeleide y' berekend wordt.



Na een aantal iteraties wordt het definitieve

punt (x_i, y_i) gevonden. Het kan wellicht van voordeel zijn de eerste stap van dit proces uit te voeren met een 45° -lijn, zodat (4) dan overgaat in

$$x = y - Y_i + X_i \tag{7}$$

Dit wordt nu gesubstitueerd in (2), waaruit een waarde voor y_1 volgt waaruit met (7) de coördinaten van het punt (x_1, y_1) gevonden worden. Hierna kan de volgende stap voorbereid worden.

Zijn voor elk van de waarnemingen (X_i, Y_i) de bijbehorende punten (x_i, y_i) bekend, dan kunnen de waarden van d_i uitgerekend worden.

De normaalvergelijkingen volgen uit de Taylor-ontwikkeling naar de parameters a, b, \dots, P . Uitgaande van (3) wordt verkregen:

$$\left(\frac{\Delta F}{\sqrt{L}}\right)_i = d_i = \left(\frac{F_a}{\sqrt{L}}\right)_i \Delta a + \left(\frac{F_b}{\sqrt{L}}\right)_i \Delta b + \dots + \left(\frac{F_P}{\sqrt{L}}\right)_i \Delta P$$

waarin $(L)_i = \left(\frac{F_x F_x}{w_x} + \frac{F_y F_y}{w_y}\right)_i$

De partiële afgeleiden moeten dus alle ontwikkeld worden naar de punten (x_i, y_i) op de voorlopige curve. Met $\frac{F_a}{\sqrt{L}} = a$ enz. en $[]$ als teken voor het sommeren over alle waarnemingen worden de normaalvergelijkingen:

$$\begin{aligned} [aa] \Delta a + [ab] \Delta b + \dots + [aP] \Delta P &= [ad] \\ [ba] \Delta a + [bb] \Delta b + \dots + [bP] \Delta P &= [bd] \\ \vdots & \\ [Pa] \Delta a + [Pb] \Delta b + \dots + [PP] \Delta P &= [Pd] \end{aligned}$$

De te gebruiken partiële afgeleiden zijn

$$F_x = (1-p) \frac{0,4343}{P-x} + p \frac{0,4343}{x-C}$$

$$F_y = b$$

$$F_a = -1 \quad F_b = y \quad F_p = \log \frac{P-x}{P-C} + \log \frac{x-C}{P-C} \quad (8)$$

$$F_C = - (1-p) \frac{0,4343}{P-C} - p \frac{0,4343}{x-C} + p \frac{0,4343}{P-C}$$

$$F_P = - (1-p) \frac{0,4343}{P-x} + (1-p) \frac{0,4343}{P-C} - p \frac{0,4343}{P-C}$$

Ph. Th. Stol
Wageningen, 25 augustus 1961