MÉTODO GERAL PARA OBTENÇÃO DE TABELAS DE POLINÔMIOS ORTOGONAIS

Izaias Rangel Nogueira (1)

INTRODUÇÃO

O método de obtenção de polinômios ortogonais onde a variável independente é igualmente espaçada é bastante conhecido (ANDERSON & BANCROFT, 1952) o mesmo não acontecendo quando os níveis não são equidistantes. A fim de indicar um método geral, que sirva para os dois casos, introduziremos a metodologia seguinte, que é uma aplicação do processo geral de ortogonalização de Gram-Schimidt (AYRES Jr., 1962).

DESENVOLVIMENTO TEÓRICO

Suponhamos que desejamos interpolar um polinômio de grau p a N pares de valores (X_i, y_i), X_i fixados, não necessariamente equidistantes, e y_i valores observados.

O modelo matemático nesse caso é

$$y_i = a_0 + a_1 X_i + a_2 X_i^2 + \ldots + a_p X_i^p + e_1 , \qquad (1)$$

onde X_i, i = 1, 2, ... N. são fixados, y_i valores observados e $e_i \cap N(O,\sigma^2)$.

(1) Escola Superior de Agricultura «Luiz de Queiroz», USP, Piracicaba.

Aplicando a equação (1) para N valores encontramos

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & X_1 & X_1^2 & \dots & X_1^p \\ 1 & X_2 & X_2^2 & \dots & X_2^p \\ \\ . & .. & .. & \dots & .. \\ 1 & X_N & X_N^2 & \dots & X_N^p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \\ \dots \\ a_p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \\ \dots \\ e_N \end{bmatrix}$$

ou simbolicamente $Y = X\beta + \epsilon$,

Desenvolvendo a matriz do 2.º membro como função linear dos elementos da coluna, resulta

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix} = a_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{bmatrix} + a_1 \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \dots \\ X_N \end{bmatrix} + a_2 \begin{bmatrix} X_1^2 \\ X_2^2 \\ \dots \\ X_N^2 \end{bmatrix} + \dots + \begin{bmatrix} X_1^p \\ X_2^p \\ \dots \\ X_N^p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \dots \\ e_N \end{bmatrix}$$

Se representarmos por Q_r, $r = 0, 1, \dots, p$, as matrizes colunas do segundo membro, por Y a matriz do primeiro membro e por ϵ a matriz dos erros, fica

$$Y = a_0Q_0 + a_1Q_1 + a_2Q_2 + \dots + a_pQ_p + \varepsilon,$$

Cada Q_r também pode ser escrito como vetor

$$Q_r = (X_1^r, X_2^r, \dots X_N^r) .$$

A estimação dos parâmetros de (1) é feita pelo método dos quadrados mínimos ou seja de

$$X' X\hat{B} = X' Y .$$

Sendo $X = [Q_0, Q_1, Q_2, \dots Q_p]$

$$X'X = \begin{bmatrix} Q_0' \\ Q_1' \\ Q_2' \\ \cdots \\ Q_p' \end{bmatrix} [Q_0, Q_1, Q_2 \ldots Q_p], \text{ ou}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} Q_0' Q_0 & Q_0' Q_1 & \cdots & Q_0' Q_p \\ Q_i' Q_0 & Q_i' Q_1 & \cdots & Q_1' Q_p \\ \cdots & \cdots & & \cdots \\ Q_p' Q_0 & Q_p' Q_1 & \cdots & Q_p' Q_p \end{bmatrix}$$

Mas cada $Q'_i Q_j$ pode ser interpretado como produto escalar de um vetor

$Q_i = (X_1^i, X_2^i, \ldots X_N^i)$ por

$Q_j = (X_1^j, X_2^j, \ldots X_N^j)$ ou seja

$Q_i' Q_j = Q_i \times Q_j$.

Do mesmo modo podemos obter

$$X'Y = \begin{bmatrix} Q_0' \\ Q_i' \\ \\ \cdots \\ Q_p' \end{bmatrix} Y = \begin{bmatrix} Q_0 \times Y \\ Q_1 \times Y \\ \\ \cdots\cdots \\ Q_p \times Y \end{bmatrix}$$

O sistema de equações normais será, pois,

$$\begin{bmatrix} Q_0 \times Q_0 & Q_0 \times Q_1 & \cdots & Q_0 \times Q_p \\ Q_1 \times Q_0 & Q_1 \times Q_1 & \cdots & Q_1 \times Q_p \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_p \times Q_0 & Q_p \times Q_1 & \cdots & Q_p \times Q_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a}_0 \\ \hat{a}_1 \\ \cdots \\ \hat{a}_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_0 \times Y \\ Q_1 \times Y \\ \cdots \\ Q_p \times Y \end{bmatrix} \qquad (2)$$

Substituindo os vetores Q_r e desenvolvendo os termos indicados acima encontramos

$$\begin{cases} N\hat{a}_0 + \hat{a}_1 \sum_i X_i + \hat{a}_2 \sum_i X_i^2 + \ldots + \hat{a}_p \sum_i X_i^p = \sum_i y_i \\ \hat{a}_0 \sum_i X_i + \hat{a}_1 \sum_i X_i^2 + \hat{a}_2 \sum_i X_i^3 + \ldots + \hat{a}_p \sum_i X_i^{p+1} = \sum_i X_i y_i \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \hat{a}_0 \sum_i X_i^p + \hat{a}_1 \sum X_i^{p+1} + \hat{a}_2 \sum X_i^{p+2x} + \ldots + \hat{a}_p \sum_i X_i^{2p} = \sum_i X_i^p y_i \end{cases}$$

Quanto maior o grau do polinômio tanto mais difícil se torna a solução do sistema de equações acima.

A solução seria fácil se os parâmetros pudessem ser obtidos independentemente de cada equação, o que não acontece nesse caso. Podemos porém, transformar os vetores Q_r em P_r, de modo a transformar o sistema acima numa forma onde os parâmetros possam ser obtidos diretamente de cada equação (diremos nesse caso que os parâmetros são independentes).

Isto se consegue transformando os vetores Q_r em P_r e então teríamos:

$$Y = \hat{a}_0 Q_0 + \hat{a}_1 Q_1 + \ldots + \hat{a}_p Q_p = \hat{b}_0 P_0 + \hat{b}_1 P_1 + \ldots + \hat{b}_p P_p$$

onde P_r são os polinômios ortogonais.

Se as coordenadas de P_r forem representadas por

$$P_{ri} = C_{r0} + C_{r1} X_i + C_{r2} X_i^2 + \ldots + C_r^r X_i^p$$

o polinômio interpolado poderia ser representado por

$$\hat{y}_i = P_{0i} + \hat{b}_0 P_{Ii} + \hat{b}_1 P_{2i} + \ldots + \hat{b}_p \hat{P}_{pi} \quad . \qquad (3)$$

Os polinômios P_r serão ortogonais se atenderem à propriedade

$$P_i \times P_j = 0$$

para todo $i \neq j$.

Com o uso desses polinômios o sistema (2) é conduzido à forma

$$\begin{cases} \hat{b}_0\, P_0 \times P_0 & = P_0 Y \\ \quad \hat{b}_1\, P_1 \times P_1 & = P_1 Y \\ \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots & = \\ \qquad\quad \hat{b}_p\, P_p \times P_p & = P_r Y \end{cases}$$

de onde se obtém facilmente

$$\hat{b}_0 = \frac{P_0 \times Y}{P_0 \times P_0} = \frac{\sum_i y_i}{N} = \bar{y} \ ,$$

$$\hat{b}_1 = \frac{P_1 \times y}{P_1 \times P_1} \ , \quad \hat{b}_2 = \frac{P_2 \times y}{P_2 \times P_2} \ , \ \ldots \ ,$$

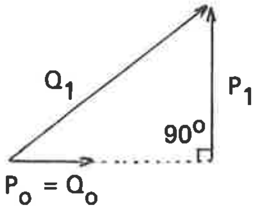
$$\hat{b}_p^{\ *} = \frac{P_p \times y}{P_p \times P_p} \ .$$

TRANSFORMAÇÃO DOS POLINÔMIOS Q_r EM POLINÔMIOS ORTOGONAIS P_r

Em primeiro lugar definimos $P_0 = Q_0$.

É fácil compreendermos que podemos escrever Q_1 como função linear de P_1 e $Q_0 = P_0$, como sugere a figura abaixo.

Então, $Q_1 = \propto Q_0 + P_1$ ou



$$P_i = Q_1 - \propto P_0$$

onde α é um escalar.

Obtemos o valor de α multiplicando os dois membros da igualdade por P_0 (produto escalar).

$$P_0 \times P_1 = Q_1 \times P_0 - \propto P_0 \times P_0 \, ,$$

e sendo

$$P_0 \times P_1 = 0 ,$$

obtemos

$$\propto = \frac{Q_1 \times P_0}{P_0 \times P_0} \, ,$$

e resulta

$$P_1 = Q_1 - \frac{Q_1 \times P_0}{P_0 \times P_0} \; P_0 \, .$$

Considerando os vetores Q_2, P_0, P_1 e P_2, podemos analogamente exprimir Q_2 como função linear dos vetores P_0, P_1, P_2, ou seja:

$$Q_2 = P_2 + \propto P_0 + \beta P_1 \; .$$

Os valores de α e β são obtidos da igualdade acima multiplicando os membros da igualdade por P_0 e P_1.
Encontraremos

$$\propto = \frac{Q_2 \times P_0}{P_0 \times P_0} \, , \quad \beta = \frac{Q_2 \times P_1}{P_1 \times P_1}$$

resulta que

$$P_2 = Q_2 - \frac{Q_2 \times P_0}{P_0 \times P_0} P_0 - \frac{Q_2 \times P_1}{P_1 \times P_1} P_1 .$$

Continuando por esse processo conseguiremos a seguinte fórmula:

$$P_r = Q_r - \frac{Q_r \times P_0}{P_0 \times P_0} P_0 - \frac{Q_r \times P_1}{P_1 \times P_1} P_1 - \ldots - \frac{Q_r \times P_{r-1}}{P_{r-1} \times P_{r-1}} P_{r-1}$$

que exprime P_r em função linear de Q_r e dos vetores P_0, P_1 ... , P_{r-1}.

EXEMPLO DE APLICAÇÃO
Suponhamos dados os pares de valores

X_i	y_i
0	y_1
1	y_2
2	y_3
4	y_4

e que queremos interpolar um polinômio do 3.º grau:

$$\hat{y}_i = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 X_i + \hat{a}_2 X_i^2 + \hat{a}_3 X_i^3 .$$

Para os índices r = 0, 1, 2, 3 os vetores

$$Q_r = (X_1^r , X_2^r , X_3^r , X_4^r) \text{ são:}$$

$P_0 = Q_0$	Q_1	Q_2	Q_3
1	0	0	0
1	1	1	1
1	2	4	8
1	4	16	64

Fazemos inicialmente $Q_0 = P_0$ e

$$P_1 = Q_1 - \frac{Q_1 \times P_0}{P_0 \times P_0} P_0 .$$

Sendo $Q_1 \times P_0 = 4 + 2 + 1 = 7$

$P_0 \times P_0 = 4$

$$P_1 = Q_1 - \frac{7}{4} P_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix} - \frac{7}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7/4 \\ -3/4 \\ 1/4 \\ 9/4 \end{bmatrix}$$

A fim de facilitar a obtenção dos outros vetores P_2 e P_3, é conveniente ir acrescentando no quadro acima os vetores obtidos. Assim, acrescentando P_1 teremos

$Q_0 = P_0$	Q_1	Q_2	Q_3	P_1	P_2	P_3
1	0	0	0	- 7/4		
1	1	1	1	- 3/4		
1	2	4	8	1/4		
1	4	16	64	9/4		

Se estivermos interessados numa expressão teórica para P_1, neste caso faríamos

$$P_1 = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{bmatrix} - \frac{7}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 - 7/4 \\ X_2 - 7/4 \\ X_3 - 7/4 \\ X_4 - 7/4 \end{bmatrix} \quad \text{o u}$$

as coordenadas de P_1, $P_{1i} = X_i - 7/4$,

P_2 será obtido de

$$P_2 = Q_2 - \frac{Q_2 \times P_0}{P_0 \times P_0} P_0 - \frac{Q_2 \times P_1}{P_1 \times P_1} P_1$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 4 \\ 16 \end{bmatrix} - \frac{0 + 1 + 4 + 16}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{0 - \frac{3}{4} + 1 + 26}{(\frac{7}{4})^2 + (\frac{3}{4})^2 + (\frac{1}{4}) + (\frac{9}{4})^2} \begin{bmatrix} -7/4 \\ -3/4 \\ 1/4 \\ 9/4 \end{bmatrix}$$

$$P_2 = \begin{bmatrix} 14/7 \\ -\ 8/7 \\ -16/7 \\ 10/7 \end{bmatrix}$$

As coordenadas de P_2, P_{2i} são dadas por

$$P_{2i} = x_i^2 - \frac{29}{7} x_i + 2 .$$

que pode ser obtido como no caso de P_{1i}.

Obtemos P_3 de

$$P_3 = Q_3 - \frac{Q_3 \times P_0}{P_0 \times P_0} P_0 - \frac{Q_3 \times P_1}{P_1 \times P_1} P_1 - \frac{Q_3 \times P_2}{P_2 \times P_2} P_2$$

$$= Q_3 - \frac{73}{4} P_0 - \frac{581}{35} P_1 - \frac{63}{11} P_2 = \begin{bmatrix} -\ 36/55 \\ 96/55 \\ -\ 72/55 \\ 12/55 \end{bmatrix}$$

A forma teórica de P_{3i} nesse caso é

$$P_{3i} = X_i^3 - \frac{63}{11} X_i^2 + \frac{392}{55} X_i - \frac{36}{55} .$$

Para o caso estudado teremos em resumo:

P_1	P_2	P_3
$-7/4$	$14/7$	$-36/55$
$-3/4$	$-\ 8/7$	$96/55$
$1/4$	$-14/7$	$-72/55$
$9/4$	$10/7$	$12/55$

As estimativas dos parâmetros serão dadas por

$$\hat{b}_0 = \frac{P_0 \times y}{P_0 \times P_0} = \frac{y_1 + y_2 + y_3 + y_4}{4} = \bar{y} .$$

$$\hat{b}_1 = \frac{P_1 \times y}{P_1 \times P_1}, \quad \hat{b}_2 = \frac{P_2 \times y}{P_2 \times P_2}, \quad \hat{b}_3 = \frac{P_3 \times y}{P_3 \times P_3} ,$$

o polinômio interpolado será

$$\hat{y}_i = \bar{y} + \hat{b}_1 P_{1i} + \hat{b}_2 P_{2i} + \hat{b}_3 P_{3i},$$

que, referido as coordenadas de Q_{ri}, seria

$$\hat{y}_i = \bar{y} + \hat{b}_1 (X_i - 7/4) + \hat{b}_2 (X_i^2 - \frac{29}{7} X_i + 2) +$$

$$+ \hat{b}_3 (X_i^3 - \frac{63}{11} X_i^2 + \frac{392}{55} X_i - \frac{36}{55}).$$

Um modo prático de apresentar a tabela acima é figurar com números inteiros e indicar na parte de baixo da tabela os números K_i e M_i, o 1.º indicando a soma dos quadrados dos números tabulados e o 2.º, M_i, o inverso do fator de arredondamento. Ficaria então:

	P_1	P_2	P_3
	- 7	7	- 3
	- 3	- 4	8
	1	- 8	- 6
	9	5	1
K	140	154	110
M	4	7/2	55/12

Nesse caso o polinômio interpolado será

$$y_i = \bar{y} + \beta_1 M_1 P_{1i} + \beta_2 M_2 P_{2i} + \beta_3 M_3 P_{3i}$$

Verificamos que

$$\beta_1 M_1 = \hat{b}_1, \quad \beta_2 M_2 = \hat{b}_2 \text{, etc.}$$

Genericamente

$$\beta_r = \frac{P_r \times y}{K},$$

onde

$$K = P_r \times P_r .$$

SUMMARY

This paper presents a general practical method to calculate tables of orthogonal polynomials, which is valuable specially when dealing with unequally spaced levels.

BIBLIOGRAFIA

ANDERSON, R.L. & T.A. BANCROFT, 1952 - **Statistical theory in research**, 1.a edição, Editora McGraw-Hill, New York, 399p.

AYRES Jr., F., 1971. **Matrizes**, Editora McGraw-Hill do Brasil, Rio de Janeiro.