MATHEMATISCH CENTRUM
2e BOERHAAVESTRAAT 49
AMSTERDAM

REKENAFDELING

CURSUS WETENSCHAPPELIJK REKENAAR(STER)

Numerieke Wiskunde

Deel I

door

J.A. Zonneveld

1 9 5 7

CURSUS WETENSCHAPPELIJK REKENAAR(STER).

Numerieke Wiskunde

1. Interpolatie

1.1 Inleiding.

In de numerieke wiskunde heeft men veelal te maken met getabelleerde functies d.w.z. een tabel van functiewaarden gegeven voor een aantal waarden van één of meer argumenten b.v. $\sin z$ voor $z = x + iy$ waarbij de argumenten x en y ieder een bepaald gebied doorlopen. Wij zullen ons voorlopig beperken tot functies van een variabele.
Wil men de functie kennen voor een argument dat niet in de tabel voorkomt dan kan men door middel van interpolatie trachten deze te bepalen. Daartoe zoekt men een benaderingsfunctie die men analytisch kent en voor een willekeurig argument kan berekenen. Deze benaderingsfunctie kan bestaan uit een polynoom of uit sommen van trigonometrische of exponentiele functies, enz. Uit de analyse echter is bekend dat volgens de stelling van Weierstrasz iedere functie die over een eindig interval continu is, door een polynoom willekeurig dicht benaderd kan worden. Daar verder polynomen overgaan in polynomen bij differentiatie en integratie ligt het voor de hand polynoom-interpolatie te beschouwen.

1.2 Interpolerend polynoom.

Laat gegeven zijn $f(x)$ voor $x = x_i$ met $i = 0(1)n$ en $x_i \neq x_j$
Gevraagd het polynoom $f_n^*(x)$ van graad n zodat $f_n^*(x_i)$
Dan moet gelden, als

$$f_n^*(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots \, a_{n-1}x + a_n \qquad (1.2.1)$$

$$\left\{\begin{array}{l} a_0x_0^n + a_1x_0^{n-1} + \dots + a_{n-1}x_0 + a_n = f(x_0) \\ a_0x_1^n + a_1x_1^{n-1} + \dots + a_{n-1}x_1 + a_n = f(x_1) \\ \dots\dots \\ \dots\dots \\ a_0x_n^n + a_1x_n^{n-1} + \dots + a_{n-1}x_n + a_n = f(x_n) \end{array}\right. \qquad (1.2.2)$$

Uit (1.2.2) zou men a_i kunnen oplossen en door substitutie in (1.2.1) $f_n^*(x)$ kunnen bepalen. Echter moet ook gelden:

$$a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n = f_n^*(x) \qquad (1.2.3)$$

(1.2.2) en (1.2.3) geven $n + 2$ lineaire vergelijkingen voor de $n + 1$ onbekenden a_i
Dus moet gelden:

$$\begin{vmatrix} 1 & x & x^2 \ldots\ldots x^n & f_n^*(x) \\ 1 & x_0 & x_0^2 \ldots\ldots x_0^n & f(x_0) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & & & \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 \ldots\ldots x_n^n & f(x_n) \end{vmatrix} = 0 \qquad (1.2.4)$$

$$\text{Stel } f(x) = f_n^*(x) + R_{n+1}(x) \qquad (1.2.5)$$

waarbij $R_{n+1}(x)$ de fout is die we maken bij vervanging van $f(x)$ door $f_n^*(x)$. Dan geldt $R_{n+1}(x_i) = 0$ $i = 0(1)n$.

Substitutie van (1.2.5) in (1.2.4) geeft:

$$\begin{vmatrix} 1 & x & x^2 \ldots\ldots x^n & f(x) - R_{n+1}(x) \\ 1 & x_0 & x_0^2 \ldots\ldots x_0^2 & f(x_0) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & & & \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 \ldots\ldots x_n^n & f(x_n) \end{vmatrix} = 0 \quad (1.2.6)$$

1.3 Formule van Lagrange.

Ontwikkelen wij (1.2.6) naar de laatste kolom dan geldt:

$$\left\{f(x) - R_{n+1}(x)\right\} \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ & & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{vmatrix} =$$

$$f(x_0) \begin{vmatrix} 1 & x & x^2 & \ldots & x^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ & & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{vmatrix} - f(x_1) \begin{vmatrix} 1 & x & \ldots & x^n \\ 1 & x_0 & \ldots & x_0^n \\ & & & \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^n \end{vmatrix} + \ldots\ldots$$

$$+ \ldots\ldots + (-)^n f(x_n) \begin{vmatrix} 1 & x & \ldots & x^n \\ 1 & x_0 & \ldots & x_0^n \\ & & & \\ 1 & x_{n-1} & \ldots & x_{n-1}^n \end{vmatrix} \qquad (1.3.1)$$

De in (1.3.1) optredende determinanten zijn Vandermonde determinanten. Voor die in het linkerlid vindt men:

$$
\begin{array}{l}
(x_n - x_0)(x_n - x_1) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(x_n - x_{n-1}) \\
(x_{n-1} - x_0)(x_{n-1} - x_1)\ldots\ldots(x_{n-1} - x_{n-2}) \\
\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\ldots\ldots\ldots\ldots \\
(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) \\
(x_1 - x_0)
\end{array}
\qquad (1.3.2)
$$

Na substitutie van dergelijke uitkomsten voor alle determinanten in (1.3.1) vindt men:

$$
f(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \ldots\ldots (x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \ldots\ldots (x_0 - x_n)} f(x_0) +
$$

$$
\frac{(x - x_0)(x - x_2) \ldots\ldots (x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \ldots\ldots (x_1 - x_n)} f(x_1) + \ldots\ldots
$$

$$
+\ldots\ldots+ \frac{(x - x_0)(x - x_1) \ldots\ldots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \ldots\ldots (x - x_{n-1})} f(x_n) + R_{n+1}(x) \qquad (1.3.3)
$$

Dit is de <u>interpolatieformule van Lagrange</u>; de factoren waarmee $f(x_i)$ vermenigvuldigd worden heten Lagrangecoëfficiënten.

Stelt men

$$
\pi_{n+1}(x) = (x - x_0) \ldots\ldots (x - x_n) \text{ dan is}
$$

$$
\pi'_{n+1}(x_i) = (x_i - x_0) \ldots\ldots (x_i - x_n)
$$

Hiermede gaat (1.3.3) over in

$$
f(x) = \sum_{0}^{n}{}_i \frac{f(x_i) \;\; \pi_{n+1}(x)}{\pi'_{n+1}(x_i) \; (x - x_i)} + R_{n+1}(x) \qquad (1.3.4).
$$

Stel $f(x) \equiv f_m(x)$, een polynoom van de graad $m \leq n$. Dan is daar $f_m(x) = f^*_n(x) + R_{n+1}(x)$, $R_{n+1}(x)$ een polynoom van de graad $\leq n$, dat $n + 1$ nulpunten x_i heeft: R_{n+1} is dus identiek nul, dus $f_m(x) \equiv f^*_n(x)$.

Dit geldt dus ook voor een constante b.v. $f(x) \equiv 1$. Hiermede volgt uit (1.3.3) dat de som van de Lagrangecoëfficienten gelijk 1 is.

1.4 Formule van Newton

Stel we hebben een benaderend polynoom $f^*_{n-1}(x)$ van de graad $n - 1$ zodat

$$f^*_{n-1}(x_i) = f(x_i) \quad \text{voor } i = 0(1)n-1$$

en stel dat we het basispunt x_n met $f(x_n)$ toevoegen als gegeven punt. Dit geeft approximatie $f^*_n(x)$, een n^e-graads-polynoom.

Stel nu

$$f^*_n(x) = f^*_{n-1}(x) + c\,\varphi_n(x) \qquad (1.4.1)$$

waarbij $\varphi_n(x)$ een n^e-graadspolynoom en c een constante is.

Nu moet gelden, daar $f^*_n(x_i) = f^*_{n-1}(x_i) = f(x_i)$ voor $i = 0(1)n-1$ $\quad \varphi_n(x_i) = 0 \quad i = 0(1)n-1$

dus kunnen we $\varphi_n(x) = \pi_n(x)$ stellen. Daar de coëfficiënt van x^n in $\pi_n(x)$ gelijk 1 is, is c dus de coëfficiënt van x^n in $f^*_n(x)$.

Schrijf voor c: $f[x_0 x_1 \ldots\ldots x_n]$.

Dan volgt uit ontwikkeling van (1.2.4) naar de eerste rij dat

$$f[x_0 x_1 \ldots\ldots x_n] =$$

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^{n-1} & f(x_0) \\ \ldots & \ldots & \ldots & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^{n-1} & f(x_n) \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ \ldots & \ldots & \ldots & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{vmatrix} \qquad (1.4.2)$$

en $f^*_n(x) = f^*_{n-1}(x) + f[x_0\, x_1 \ldots x_n] \cdot \pi_n(x) \qquad (1.4.3)$

Dit afbreken voortzettend vindt men

$$f^*_n(x) = f(x_0) + f[x_0 x_1](x - x_0) + f[x_0 x_1 x_2](x - x_0)(x - x_1) + \ldots + f[x_0 x_1 \ldots\ldots x_n](x - x_0) \ldots\ldots (x - x_n) \qquad (1.4.4)$$

of $f(x) = f(x_0) + f[x_0 x_1](x - x_0) + \ldots\ldots$

$$\ldots + f[x_0 x_1 \ldots x_n](x - x_0) \ldots (x - x_n) + R_{n+1}(x) \qquad (1.4.5)$$

(1.4.5) is de bekende <u>interpolatie-formule van Newton</u>.

De definitie (1.4.2) is weinig geschikt voor gebruik in (1.4.5). Om een andere uitdrukking te vinden gaan wij als volgt te werk. Stel bekend een polynoomapproximatie $f^*_{n-2}(x)$ zodat $f^*_{n-2}(x_i) = f(x_i)$ voor $i = 1(1)n-1$. Voeg vervolgens toe het basispunt x_0 en daarna x_n. Wij vinden dan eerst

$$f^*_{n-1}(x) = f^*_{n-2}(x) + f[x_1 x_2 \ldots x_{n-1} x_0](x - x_1) \ldots (x - x_{n-1}).$$

en vervolgens

$$f_n^*(x) = f_{n-2}^*(x) + f[x_1 \dots x_{n-1}x_0](x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) +$$

$$+ f[x_1 \dots x_{n-1}x_0x_n](x - x_1) \dots (x - x_{n-1})(x - x_0) \qquad (1.4.6)$$

Voegen wij eerst toe x_n en daarna x_0 dan krijgen we

$$f_n^*(x) = f_{n-2}^*(x) + f[x_1 \dots x_{n-1}x_n](x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) +$$

$$+ f[x_1 \dots x_{n-1}x_nx_0](x - x_1) \dots (x - x_{n-1})(x - x_n) \qquad (1.4.7)$$

De twee uitdrukkingen (1.4.6) en (1.4.7) zijn identiek; dus vinden wij daar volgens (1.4.2) in $f[x_0 \dots\dots x_n]$ de argumenten gepermuteerd mogen worden:

$$f[x_0 \dots x_n] = \frac{f[x_0 \dots x_{n-1}] - f[x_1 \dots x_n]}{x_0 - x_n} \qquad (1.4.8)$$

Als we stellen $f[x_0] = f(x_0)$

dan is $f[x_0x_1] = \dfrac{f[x_0] - f[x_1]}{x_0 - x_1}$

$f[x_0x_1]$ heet eerste gedeelde differentie;

$$f[x_0x_1x_2] = \frac{f[x_0x_1] - f[x_1x_2]}{x_0 - x_2}$$

De gedeelde differenties zijn dus eenvoudig uit de gegeven tabel te bepalen. Ze worden als volgt genoteerd:

x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0x_1]$		
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0x_1x_2]$	
		$f[x_1x_2]$		$f[x_0x_1x_2x_3]$
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1x_2x_3]$	
		$f[x_2x_3]$		
x_3	$f[x_2]$			

x	$f(x) = x^3$						
0	0						
		1					
1	1		4				
		13		1			
3	27		10		0		
		63		1		0	
6	216		16		0		0
		127		1		0	
7	243		24		0		
		247		1			
11	1331		30				
		397					
12	1728						

Uit (1.4.2) volgt eenvoudig dat, als $f(x_0) = \sum_0^n a_k x^k$,
$f[x_0 \ldots\ldots x_n] = a_n$ is. Dus van een n^e-graadspolynoom zijn n^e gedeelde differenties constant en alle hogere differenties nul.

1.5 Restterm.

Zonder iets te weten, b.v. een schatting van de restterm $R_{n+1}(x)$ zijn de formules van Lagrange (1.3.3) en Newton (1.4.5) slecht bruikbaar. $R_{n+1}(x)$ is immers de fout die bij de interpolatie gemaakt wordt.
Om $R_{n+1}(x)$ te schatten gaan wij uit van (1.2.6):

$$\begin{vmatrix} 1 & x & x^2 & \ldots\ldots & x^n & f(x) - R_{n+1}(x) \\ 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots\ldots & x_0^n & f(x_0) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots\ldots & x_n^n & f(x_n) \end{vmatrix} = 0 \qquad (1.5.1)$$

Direct volgt hieruit:

$$R_{n+1}(x) = \begin{vmatrix} 1 & x & x^2 & \ldots & x^n & f(x) \\ 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n & f(x_0) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n & f(x_n) \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{vmatrix}$$

(1.5.2)

Met de definitie van de gedeelde differenties (1.4.2) vinden wij hiervoor

$$R_{n+1}(x) = f[x_0 x_1 \ldots x_n x] . \begin{vmatrix} 1 & x & \ldots & x^{n+1} \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^{n+1} \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^n \end{vmatrix}$$

(1.5.3)

Beide determinanten zijn weer van het type Vandermonde: het quotient is $\pi_{n+1}(x)$.
Dus

$$R_{n+1}(x) = f[x_0 x_1 \ldots\ldots x_n x] . \pi_{n+1}(x) \qquad (1.5.4)$$

Met (1.5.9) kunnen wij echter nog niets beginnen: rechts komt voor een gedeelde differentie waarin het argument x en waarin dus f(x) voorkomt, die wij niet kennen! Beschouw echter

$$R_{n+1}(x) = f(x) - f_n^*(x). \qquad (1.5.5)$$

Nu geldt $R_{n+1}(x_i) = 0$ voor $i = 0(1)n$. Laat nu $a \leqslant x_i \leqslant b$ en laat $f(x)$ een n^e afgeleide hebben voor $a \leqslant x \leqslant b$.
$f_n^*(x)$ is een n^e-graadspolynoom met als coëfficiënt van x^n volgens (1.4.1) en (1.4.2):

$$f[x_0 x_1 \; \ldots\ldots \; x_n].$$

De n^e afgeleide van $f_n^*(x)$ is dus $n!f[x_0x_1 \; \ldots\ldots \; x_n]$
Nu heeft $R_{n+1}(x)$ minstens n nulpunten op $a \leqslant x \leqslant b$. De n^e afgeleide van $R_{n+1}(x)$ heeft dus volgens de stelling van Rolle minstens één nulpunt ξ met $a \leqslant \xi \leqslant b$. Dus geldt:

$$0 = f^{(n)}(\xi) - n!f[x_0x_1 \; \ldots\ldots \; x_n].$$

of

$$f^{(n)}(\xi) = n!f[x_0x_1 \; \ldots\ldots \; x_n] \quad a \leqslant \xi \leqslant b. \qquad (1.5.6)$$

Hebben wij i.p.v. de basispunten $x_0x_1 \; \ldots\ldots \; x_n$ de punten $x_0x_1 \; \ldots\ldots \; x_nx$ dan vinden wij

$$f^{(n+1)}(\xi) = (n+1)!f[x_0x_1 \; \ldots\ldots \; x_nx] \qquad \begin{array}{l}\xi \geqslant \min x_0 \ldots x_nx \\ \xi \leqslant \max x_0 \ldots x_nx\end{array}$$

en gesubstitueerd in (1.5.4) vinden wij:

$$R_{n+1}(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\, \pi_{n+1}(x) \qquad (1.5.7)$$

waarbij $\xi \geqslant \min x_0 \; \ldots\ldots \; x_nx$
$\xi \leqslant \max x_0 \; \ldots\ldots \; x_nx$.

(1.5.7) geeft dus een schatting voor $R_{n+1}(x)$ uitgedrukt in $f^{(n)}(\xi)$. Kent men dus een bovengrens voor $f^{(n)}(x)$ op het beschouwde interval dan heeft men tevens een bovengrens voor de fout.

1.6 Iteratieve Interpolatie volgens Aitken

Als derde interpolatieprocedé behandelen wij het proces van Aitken. Nemen wij lineaire interpolatie, b.v. de tweepunts Lagrange formule:

$$f(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) \qquad (1.6.1)$$

Schrijf dit als

$$f_{0,1}(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f_0(x) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f_1(x)$$

waarbij $f_0(x)$ en $f_1(x)$ twee 0-de graads polynomen, dus constanten, zijn; $f_{0,1}$ is dan een 1^e graads polynoom.

Vervolgens schrijven wij (1.6.2) in determinantvorm:

$$f_{0,1}(x) = \frac{1}{x_1 - x_0}\begin{vmatrix} f_0(x) & x_0 - x \\ f_1(x) & x_1 - x \end{vmatrix}. \tag{1.6.3}$$

Vorm nu

$$f_{0,1,2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_0}\begin{vmatrix} f_{0,1}(x) & x_0 - x \\ f_{1,2}(x) & x_2 - x \end{vmatrix} \tag{1.6.4}$$

$f_{0,1,2}(x)$ is een 2^e graads polynoom in x, waarvoor geldt:

$$f_{0,1,2}(x_0) = \frac{1}{x_2 - x_0} \cdot f_{0,1}(x_0).(x_2 - x_0) = f_0(x)$$

$$f_{0,1,2}(x_2) = \frac{1}{x_2 - x_0} \cdot f_{1,2}(x_2).(x_0 - x_2) = f_2(x)$$

$$f_{0,1,2}(x_1) = \frac{1}{x_2 - x_0}\begin{vmatrix} f_{0,1}(x_1) & x_0 - x_1 \\ f_{1,2}(x_1) & x_2 - x_1 \end{vmatrix} =$$

$$\frac{1}{x_2 - x_0}\begin{vmatrix} f_1(x) & x_0 - x_1 \\ f_1(x) & x_2 - x_1 \end{vmatrix} = f_1(x)$$

$f_{0,1,2}(x)$ stemt dus overeen met het 2^e graads interpolatie-polynoom. Dit proces herhalend krijgt men:

$$f_{0,1,\ldots,n}(x) = \frac{1}{x_n - x_0}\begin{vmatrix} f_{0,\ldots,n-1}(x) & x_0 - x \\ f_{1,\ldots,n}(x) & x_n - x \end{vmatrix} \tag{1.6.5}$$

Dit is equivalent met n + 1 punts Lagrange-interpolatie.
Men schrijft de berekeningen als volgt op:

$$\begin{array}{lllllll}
x_0 & x_0 - x & f_0 & & & & \\
 & & & f_{0,1} & & & \\
x_1 & x_1 - x & f_1 & & f_{0,1,2} & & \\
 & & & f_{1,2} & & f_{0,1,2,3} & \\
x_2 & x_2 - x & f_2 & & f_{1,2,3} & & \\
 & & & f_{1,3} & & & \\
x_3 & x_3 - x & f_3 & & & &
\end{array}$$

Wat men doet is dus herhaalde lineaire interpolatie toegepast op de grootheden $f_{0,\ldots,n}(x)$ en $f_{1,\ldots,n+1}(x)$.

Heeft men gegeven de basispunten x_0 x_1 x_2 x_3 x_4 x_5 en moet men interpoleren voor $x_2 < x < x_3$ dan gaat men als volgt te werk. Allereerst interpoleert men lineair tussen x_2 en x_3: $f_{2,3}$. Stel $|x_1 - x| < |x_4 - x|$ dan voegt men x_1 toe: dit geeft kwadratische interpolatie: $f_{2,3,1}$; vervolgens x_4: $f_{2,3,1,4}$; enz. Geeft toevoeging van basispunten geen verandering dan stopt men:

x_2	$x_2 - x$	f_2					
			$f_{2,3}$				
x_3	$x_3 - x$	f_3		$f_{2,3,1}$			
			$f_{3,1}$		$f_{2,3,1,4}$		
x_1	$x_1 - x$	f_1		$f_{3,1,4}$		$f_{2,3,1,4,0}$	
			$f_{1,4}$		$f_{3,1,4,0}$		$f_{2,3,1,4,0,5}$
x_4	$x_4 - x$	f_4		$f_{1,4,0}$		$f_{3,1,4,0,5}$	
			$f_{4,0}$		$f_{1,4,0,5}$		
x_0	$x_0 - x$	f_0		$f_{4,0,5}$			
			$f_{0,5}$				
x_5	$x_5 - x$	f_5					

Voorbeeld:
Gevraagd in onderstaande tabel $f(21)$ te bepalen:

x_n	$x_n - x$	$f(x_n)$					
19	-2	33312					
			36860				
23	2	40408		36854			
			36833		36855		
28	7	49345		36852		36855	
			36928		36854		36855
43	-8	22738		36841		36854	
			36990		36855		
33	12	58367		36882			
			37071				
7	-14	12225					

1.7 Inverse interpolatie

Hieronder verstaat men het zoeken van het argument waarvoor de functie een bepaalde waarde aanneemt. Dit kan men doen met behulp van een van de drie methoden Lagrange, Newton of Aitken door functie en argument om te wisselen. Hier is echter een waarschuwing op zijn plaats. Weet men dat $y = f(x)$ naar x interpoleerbaar is met een zeker aantal basispunten dan geeft dit geen garantie dat de inverse functie $x = f^{-1}(y)$ met een polynoom interpoleerbaar is.

Voorbeeld:

$y = f(x) = x^3$

x	y
0	0
1	1
2	8
3	27
4	64

Gevraagd x zodat $f(x) = 20$.
Vorm Lagrange coefficienten:

$$\frac{(20-1)(20-8)(20-27)(20-64)}{(0-1)(0-8)(0-27)(0-64)} = 5.07986$$

$$\frac{(20-0)(20-8)(20-27)(20-64)}{(1-0)(1-8)(1-2)(1-64)} = -6.44689$$

$$\frac{(20-0)(20-1)(20-27)(20-64)}{(8-0)(8-1)(8-2)(8-64)} = 1.96429$$

$$\frac{(20-0)(20-1)(20-8)(20-64)}{(27-0)(27-1)(27-8)(27-64)} = 0.40656$$

$$\frac{(20-0)(20-1)(20-8)(20-27)}{(64-0)(64-1)(64-8)(64-27)} = -0.00382$$

Somcontrole geeft 1.00000 en

$$x = 5.07986 \times 0 - 6.44689 \times 1 + 1.96429 \times 2 + 0.40656 \times 3 - 0{,}00382 \times 4 = -1.3139$$

in plaats van $x = \sqrt[3]{20} = 2.7144$

De fout is aanzienlijk. Dit komt doordat $x = \sqrt[3]{y}$ zich in de buurt van $y = 0$ allerminst als een polynoom gedraagt. De eerste afgeleide is reeds oneindig voor $y = 0$!
In een dergelijk geval moet men iteratief invers interpoleren. Dit wordt later behandeld.

1.8 Samenvallende basispunten

Samenvallende basispunten, dus $x_i = x_j$ $i \neq j$ leveren moeilijkheden op voor de formule van Lagrange. In de noemers van de coefficienten komen factoren nul voor. Dit kan verholpen worden door twee of meer termen samen te nemen en door een limiet overgang uit te voeren. Gemakkelijker gaat het met de formule van Newton. De uitdrukking voor de eerste gedeelde differentie was

$$f[x_0 x_1] = \frac{f[x_0] - f[x_1]}{x_0 - x_1}$$

Stellen wij nu $x_1 = x_0$ dan krijgen wij $f[x_0 x_0] = f'(x_0)$ (1.8.1) en de eerste differentie wordt dus vervangen door de eerste afgeleide.

Nu laten wij alle punten waarop de differentie betrekking heeft samenvallen.

(1.5.6) gaf: $f[x_0 \ldots x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi)$ met $\xi \geq \min x_0 \ldots x_n$
$\xi \leq \max x_0 \ldots x_n$

Stellen wij nu $x_i = x_0$, $i = 1(1)n$ dan wordt $\xi = x_0$ en wij krijgen: $f[\underbrace{x_0 \ldots x_0}_{n+1 \text{ maal}}] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)$. (1.8.2)

Substitutie van (1.8.2) in de formule van Newton geeft:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \ldots$$
$$\ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1} \qquad (1.8.3)$$

met $\xi \geq \min x, x_0$
$\xi \leq \max x, x_0$

Substitueer $\xi = x_0 + \theta(x - x_0)$ dan geldt dus voor $0 \leq \theta \leq 1$

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \ldots$$
$$\ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}\{x_0 + \theta(x-x_0)\}}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1} \qquad (1.8.4)$$

Dit is de Taylor-ontwikkeling met de restterm van Lagrange.

Met behulp van samenvallende basispunten kan men bij interpolatie gebruik maken zowel van functiewaarden als van gegeven afgeleiden.

Stel b.v. gegeven een functie voor x=0; 0,2; 0,3; 0,5 met gegeven afgeleide $f'(0) = 10000$ dan krijgen we de volgende differentietabel.

0	0000				
		10000			
0	0000		335		
		10067		1673	
0,2	20134		837		118
		10318		1732	
0,3	30452		1703		
		10829			
0,5	52110				

Voorbeeld:

Gevraagd een polynoom te construeren zodat

$f(0) = f'(0) = 0,\ f''(0) = 1$

$f(1) = f'(1) = 1,\ f''(1) = 0$

Maak differentietabel:

x	f(x)					
0	0					
		0				
0	0		$\frac{1}{2}$			
		0		$\frac{1}{2}$		
0	0		1		$-\frac{3}{2}$	
		1		-1		$-\frac{5}{2}$
1	1		0		1	
		1		0		
1	1		0			
		1				
1	1					

Dus $f(x) = 0 + 0.x + \frac{1}{2}.x^2 + \frac{1}{2}.x^3 - \frac{3}{2}.x^3(x-1) + \frac{5}{2}.x^3(x-1)^2 =$
$\frac{5}{2}x^5 - \frac{13}{2}x^4 + \frac{9}{2}x^3 + \frac{1}{2}x^2.$

2. Interpolatie bij gelijke intervallen

2.1 Formule van Lagrange

Wij beschouwen de basispunten $x_{-k}, x_{-k+1} \dots x_k$

De coëfficiënt van $f(x_i)$ is dan:

$$\frac{(x - x_{-k})(x - x_{-k+1}) \dots\dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots\dots (x - x_k)}{(x_i - x_{-k})(x_i - x_{-k+1}) \dots\dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots\dots (x_i - x_k)} \qquad (2.1.1)$$

Geldt nu $x_j = x_0 + j.h$ dan hebben wij gelijke intervallen van de lengte h. Wij stellen nu $x = x_0 + p.h$ en vinden dan voor (2.1.1):

$$L_i^{2k+1}(p) = \frac{(p + k)(p + k - 1) \dots\dots (p - i + 1)(p - i - 1)\dots(p-k)}{(i + k)(i + k - 1) \dots\dots (i - i + 1)(i - i - 1)\dots(i-k)} \qquad (3.1.2)$$

waarbij $L_i^{2k+1}(p)$ de coëfficiënt van $f(x_i)$ bij $2k + 1$-punts interpolatie is.

Door in teller en noemer van (2.1.2) de factor $(p - i)$ te zetten, kunnen wij herleiden tot:

$$L_i^{2k+1}(p) = (-)^{i+k} \frac{\prod_{j=0}^{2k} (p - k + j)}{(k + i)!(k - i)!(p - i)} \qquad (2.1.3)$$

Blijkbaar heeft vervanging van p door -p en van i door -i geen effect; dus geldt:

$$L_i^{2k+1}(p) = L_{-i}^{2k+1}(-p) \tag{2.1.4}$$

Hebben we i.p.v. x_{-k} t/m x_k de basispunten x_{-k+1} t/m x_k dan vinden wij

$$L_i^{2k}(p) = \frac{(p + k - 1) \ldots (p - i + 1)(p - i - 1) \ldots (p - k)}{(i + k - 1) \ldots (i - i + 1)(i - i - 1) \ldots (i - k)} \tag{2.1.5}$$

hetgeen herleid kan worden tot:

$$L_i^{2k}(p) = (-)^{i+k} \frac{\prod_{j=0}^{2k-1} (p - k + j)}{(k + i - 1)!(k - i)!(p - i)} \tag{2.1.6}$$

Vervang men hier i door 1 - i en p door 1 - p, dan verandert er niets; dus geldt:

$$L_i^{2k}(p) = L_{1-i}^{2k}(1 - p) \tag{2.1.7}$$

Dankzij de relaties (2.1.4) en (2.1.7) kan men bij tabellatie van de coëfficiënten volstaan met $0 \leq p \leq \frac{1}{2}$; een uitgebreide tabel is Columbia University Press CUP 4.

Zoals reeds eerder opgemerkt, geldt:

$$\sum_{i=-k}^{k} L_i^{2k+1}(p) = \sum_{i=-k+1}^{k} L_i^{2k}(p) = 1 \tag{2.1.8}$$

Moet men met afgeronde waarden der coëfficiënten werken, dan moet men ze zo afronden dat (2.1.8) blijft gelden.

2.2 Differenties

Nu wij gelijke intervallen hebben worden de factoren waardoor gedeeld wordt bij het bepalen van gedeelde differenties eenvoudig: om uit de n-1^e de **n^e gedeelde differentie** te bepalen moet men delen door b.v. $x_n - x_0 = n.h$; deze factor is constant. Daarom laten wij bij gelijke intervallen het delen achterwege: wij krijgen dan differenties i.p.v. gedeelde differenties: die zijn alleen door aftrekken te vormen .

Voor deze differenties zijn drie notaties gebruikelijk:

$$\begin{aligned}
&\text{voorwaartse differenties} && \Delta_p^{k+1}f = \Delta_{p+1}^{k}f - \Delta_p^{k}f. \\
&\text{achterwaartse differenties} && \nabla_p^{k+1}f = \nabla_p^{k}f - \nabla_{p-1}^{k}f. \quad (2.2.1) \\
&\text{centrale differenties} && \delta_p^{k+1}f = \delta_{p+\frac{1}{2}}^{k}f - \delta_{p-\frac{1}{2}}^{k}f.
\end{aligned}$$

waarbij $\Delta_p^0 f = \nabla_p^0 f = \delta_p^0 f = f_p$.

Uitgeschreven hebben wij, waarbij het functieteken weggelaten is:

$$\begin{array}{ccccc}
\Delta_{-1}^{-2} & & f_{-2} & & \Delta_{-3}^{2} \\
& \Delta_{-1}^{-1} & & \Delta_{-2} & \\
\Delta_{0}^{-2} & & f_{-1} & & \Delta_{-2}^{2} \\
& \Delta_{0}^{-1} & & \Delta_{-1} & \\
\Delta_{1}^{-2} & & f_{0} & & \Delta_{-1}^{2} \\
& \Delta_{1}^{-1} & & \Delta_{0} & \\
\Delta_{2}^{-2} & & f_{1} & & \Delta_{0}^{2} \\
& \Delta_{2}^{-1} & & \Delta_{1} & \\
\Delta_{3}^{-2} & & f_{2} & & \Delta_{1}^{2}
\end{array}$$

$$\begin{array}{ccccc}
\nabla_{-3}^{-2} & & f_{-2} & & \nabla_{-1}^{2} \\
& \nabla_{-2}^{-1} & & \nabla_{-1} & \\
\nabla_{-2}^{-2} & & f_{-1} & & \nabla_{0}^{2} \\
& \nabla_{-1}^{-1} & & \nabla_{0} & \\
\nabla_{-1}^{-2} & & f_{0} & & \nabla_{1}^{2} \\
& \nabla_{0}^{-1} & & \nabla_{2} & \\
\nabla_{0}^{-2} & & f_{1} & & \nabla_{2}^{2} \\
& \nabla_{1}^{-1} & & \nabla_{2} & \\
\nabla_{1}^{-2} & & f_{2} & & \nabla_{3}^{2}
\end{array}$$

$$
\begin{array}{ccccc}
\delta^{-2}_{-2} & & f_{-2} & & \delta^{2}_{-2} \\
& \delta^{-1}_{-\frac{3}{2}} & & \delta_{-\frac{3}{2}} & \\
\delta^{-2}_{-1} & & f_{-1} & & \delta^{2}_{-1} \\
& \delta^{-1}_{-\frac{1}{2}} & & \delta_{-\frac{1}{2}} & \\
\delta^{-2}_{0} & & f_{0} & & \delta^{2}_{0} \\
& \delta^{-1}_{\frac{1}{2}} & & \delta_{\frac{1}{2}} & \\
\delta^{-2}_{1} & & f_{1} & & \delta^{2}_{1} \\
& \delta^{-1}_{\frac{3}{2}} & & \delta_{\frac{3}{2}} & \\
\delta^{-2}_{2} & & f_{2} & & \delta^{2}_{2}
\end{array}
$$

Ofschoon de notatie verschillend is geldt natuurlijk b.v.

$\Delta^2_{-2} = \nabla^2_0 = \delta^2_{-1}$, het zijn immers dezelfde getallen.

De differenties met negatieve bovenindex zijn z.g. somfuncties: deze komen bij de integratieformules te pas.

Het verband tussen gedeelde differenties en voorwaartse is eenvoudig.

$$f[x_0 x_1 \,\ldots\ldots\, x_n] = \frac{1}{h^n n!} \Delta^n_0 \qquad (2.2.2)$$

Ook geldt $f[x_0 x_1 \,\ldots\ldots\, x_n] = \dfrac{1}{h^n n!} \nabla^n_n$ (2.2.3)

In centrale differenties uitgedrukt krijgt men

$$f[x_0 x_1 \,\ldots\ldots\, x_n] = \frac{1}{h^n n!} \delta^n_{\frac{n}{2}} \qquad (2.2.4)$$

3. Formule van Newton

Wij hadden gevonden $f^*(x) = f(x_0) + f[x_0 x_1](x - x_0) +$

$$f[x_0 x_1 x_2](x - x_0)(x - x_1) \,\ldots\ldots$$

Stellen wij weer $x = x_0 + ph$, dan vinden wij voor de coëfficient van

$f[x_0 \,\ldots\ldots\, x_n]$;

$$\pi_n(x) = h^n\, p(p - 1) \ldots\ldots (p - n + 1) \qquad (2.3.1)$$

Volgens (2.2.3) is $f[x_0 \,\ldots\ldots\, x_n] = \dfrac{1}{h^n n!} \Delta^n_0$

Dus de n^e term van de Newton-reeks wordt:

$$\frac{p(p-1)(p-2)\dots\dots(p-n+1)}{n!}\Delta_0^n = \binom{p}{n}\Delta_0^n \qquad (2.3.2)$$

Voor gelijke intervallen wordt de reeks van Newton dus:

$$f^*(x_0 + ph) = f(x_0) + \binom{p}{1}\Delta_0 + \binom{p}{2}\Delta_0^2 + \binom{p}{3}\Delta_0^3 \dots \qquad (2.3.3)$$

Voor de restterm vonden wij (1.5.7)

$$R_{n+1}(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\pi_{n+1}(x)$$

Na substitutie van (2.3.1) vinden wij

$$R_{n+1}(x_0 + ph) = \frac{1}{(n+1)!} \cdot h^{n+1}.p(p-1)\dots(p-n)f^{n+1}(\xi) =$$

$$\binom{p}{n+1}h^{n+1}f^{n+1}(\xi) \qquad (2.3.4)$$

4. Formules van Gauss

In de formule van Newton treden op de basispunten $x_0, x_1, \dots, x_n$. Nemen wij echter als basispunten $x_0, x_1, x_{-1}, x_2, x_{-2}$ enz. dan vinden wij de z.g. voorwaartse formule van Gauss:

$$f^*(x_0+ph) = f(x_0) + \binom{p}{1}\delta_{\frac{1}{2}} + \binom{p}{2}\delta_0^2 + \binom{p+1}{3}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \binom{p+1}{4}\delta_0^4 \dots (2.4.1)$$

Voor de restterm vinden wij:

$$R_{2n} = \binom{p+n-1}{2n} h^{2n}f^{2n}(\xi)$$

$$R_{2n+1} = \binom{p+n}{2n+1} h^{2n+1}f^{2n+1}(\xi) \qquad (2.4.2)$$

Wij kunnen echter ook nemen $x_0, x_{-1}, x_1, x_{-2}, x_2$ enz.
De achterwaartse formule van Gauss wordt dan:

$$f^*(x_0+ph) = f(x_0) + \binom{p}{1}\delta_{-\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{2}\delta_0^2 + \binom{p+1}{3}\delta_{-\frac{1}{2}}^3 + \binom{p+2}{4}\delta_0^4 \dots (2.4.3)$$

met als restterm:

$$R_{2n} = \binom{p+n}{2n}h^{2n}f^{2n}(\xi)$$

$$R_{2n+1} = \binom{p+n}{2n+1}h^{2n+1}f^{2n+1}(\xi) \qquad (2.4.4)$$

In alle resttermen moet ξ gekozen worden in het interval dat x_0+ph en alle basispunten omvat.

De formules van Gauss worden zelden gebruikt. Echter kan men ze gebruiken om belangrijkere formules eruit af te leiden.

p	$\binom{p}{2}$	$\binom{p}{3}$	$\binom{p}{4}$	$\binom{p}{5}$	$\binom{p}{6}$
0.00	0.00000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
0.01	-0.00495	+0.0032835	-0.0024544	+0.0019586	-0.0016289
0.02	-0.00980	+0.0064680	-0.0048187	+0.0038357	-0.0031836
0.03	-0.01455	+0.0095545	-0.0070942	+0.0056328	-0.0046658
0.04	-0.01920	+0.0125440	-0.0092826	+0.0073518	-0.0060775
0.05	-0.02375	+0.0154375	-0.0113852	+0.0089943	-0.0074203
0.06	-0.02820	+0.0182360	-0.0134035	+0.0105619	-0.0086960
0.07	-0.03255	+0.0209405	-0.0153389	+0.0120564	-0.0099063
0.08	-0.03680	+0.0235520	-0.0171930	+0.0134793	-0.0110530
0.09	-0.04095	+0.0260715	-0.0189670	+0.0148322	-0.0121377
0.10	-0.04500	+0.0285000	-0.0206625	+0.0161168	-0.0131620
0.11	-0.04895	+0.0308385	-0.0222808	+0.0173345	-0.0141276
0.12	-0.05280	+0.0330880	-0.0238234	+0.0184869	-0.0150360
0.13	-0.05655	+0.0352495	-0.0252915	+0.0195756	-0.0158889
0.14	-0.06020	+0.0373240	-0.0266867	+0.0206021	-0.0166877
0.15	-0.06375	+0.0393125	-0.0280102	+0.0215678	-0.0174340
0.16	-0.06720	+0.0412160	-0.0292634	+0.0224743	-0.0181292
0.17	-0.07055	+0.0430355	-0.0304476	+0.0233229	-0.0187749
0.18	-0.07380	+0.0447720	-0.0315643	+0.0241151	-0.0193725
0.19	-0.07695	+0.0464265	-0.0326146	+0.0248523	-0.0199233
0.20	-0.08000	+0.0480000	-0.0336000	+0.0255360	-0.0204288
0.21	-0.08295	+0.0494935	-0.0345217	+0.0261675	-0.0208904
0.22	-0.08580	+0.0509080	-0.0353811	+0.0267481	-0.0213093
0.23	-0.08855	+0.0522445	-0.0361793	+0.0272792	-0.0216870
0.24	-0.09120	+0.0535040	-0.0369178	+0.0277622	-0.0220246
0.25	-0.09375	+0.0546875	-0.0375977	+0.0281982	-0.0223236
0.26	-0.09620	+0.0557960	-0.0382203	+0.0285888	-0.0225851
0.27	-0.09855	+0.0568305	-0.0387868	+0.0289350	-0.0228104
0.28	-0.10080	+0.0577920	-0.0392986	+0.0292381	-0.0230007
0.29	-0.10295	+0.0586815	-0.0397567	+0.0294995	-0.0231571
0.30	-0.10500	+0.0595000	-0.0401625	+0.0297202	-0.0232809
0.31	-0.10695	+0.0602485	-0.0405171	+0.0299016	-0.0233731
0.32	-0.10880	+0.0609280	-0.0408218	+0.0300448	-0.0234350
0.33	-0.11055	+0.0615395	-0.0410776	+0.0301510	-0.0234675
0.34	-0.11220	+0.0620840	-0.0412859	+0.0302212	-0.0234718
0.35	-0.11375	+0.0625625	-0.0414477	+0.0302568	-0.0234490
0.36	-0.11520	+0.0629760	-0.0415642	+0.0302587	-0.0234001
0.37	-0.11655	+0.0633255	-0.0416365	+0.0302281	-0.0233260
0.38	-0.11780	+0.0636120	-0.0416659	+0.0301661	-0.0232279
0.39	-0.11895	+0.0638365	-0.0416533	+0.0300737	-0.0231066
0.40	-0.12000	+0.0640000	-0.0416000	+0.0299520	-0.0229632
0.41	-0.12095	+0.0641035	-0.0415070	+0.0298020	-0.0227986
0.42	-0.12180	+0.0641480	-0.0413755	+0.0296248	-0.0226136
0.43	-0.12255	+0.0641345	-0.0412064	+0.0294214	-0.0224093
0.44	-0.12320	+0.0640640	-0.0410010	+0.0291927	-0.0221864
0.45	-0.12375	+0.0639375	-0.0407602	+0.0289397	-0.0219459
0.46	-0.12420	+0.0637560	-0.0404851	+0.0286634	-0.0216887
0.47	-0.12455	+0.0635205	-0.0401767	+0.0283648	-0.0214154
0.48	-0.12480	+0.0632320	-0.0398362	+0.0280447	-0.0211270
0.49	-0.12495	+0.0628915	-0.0394644	+0.0277040	-0.0208242
0.50	-0.12500	+0.0625000	-0.0390625	+0.0273438	-0.0205078

p	$\binom{p}{2}$	$\binom{p}{3}$	$\binom{p}{4}$	$\binom{p}{5}$	$\binom{p}{6}$
0.50	-0.12500	+0.0625000	-0.0390625	+0.0273438	-0.0205078
0.51	-0.12495	+0.0620585	-0.0386314	+0.0269647	-0.0201786
0.52	-0.12480	+0.0615680	-0.0381722	+0.0265678	-0.0198373
0.53	-0.12455	+0.0610295	-0.0376857	+0.0261539	-0.0194846
0.54	-0.12420	+0.0604440	-0.0371731	+0.0257238	-0.0191213
0.55	-0.12375	+0.0598125	-0.0366352	+0.0252783	-0.0187480
0.56	-0.12320	+0.0591360	-0.0360730	+0.0248182	-0.0183655
0.57	-0.12255	+0.0584155	-0.0354874	+0.0243444	-0.0179743
0.58	-0.12180	+0.0576520	-0.0348795	+0.0238576	-0.0175751
0.59	-0.12095	+0.0568465	-0.0342500	+0.0233585	-0.0171685
0.60	-0.12000	+0.0560000	-0.0336000	+0.0228480	-0.0167552
0.61	-0.11895	+0.0551135	-0.0329303	+0.0223268	-0.0153357
0.62	-0.11780	+0.0541880	-0.0322419	+0.0217955	-0.0159107
0.63	-0.11655	+0.0532245	-0.0315355	+0.0212549	-0.0154807
0.64	-0.11520	+0.0522240	-0.0308122	+0.0207058	-0.0150462
0.65	-0.11375	+0.0511875	-0.0300727	+0.0201487	-0.0146078
0.66	-0.11220	+0.0501160	-0.0293179	+0.0195843	-0.0141660
0.67	-0.11055	+0.0490105	-0.0285486	+0.0190134	-0.0137213
0.68	-0.10880	+0.0478720	-0.0277658	+0.0184365	-0.0132743
0.69	-0.10695	+0.0467015	-0.0269701	+0.0178542	-0.0128253
0.70	-0.10500	+0.0455000	-0.0261625	+0.0172672	-0.0123749
0.71	-0.10295	+0.0442685	-0.0253437	+0.0166762	-0.0119235
0.72	-0.10080	+0.0430080	-0.0245146	+0.0160816	-0.0114715
0.73	-0.09855	+0.0417195	-0.0236758	+0.0154840	-0.0110194
0.74	-0.09620	+0.0404040	-0.0228283	+0.0148840	-0.0105677
0.75	-0.09375	+0.0390625	-0.0219727	+0.0142822	-0.0101166
0.76	-0.09120	+0.0376960	-0.0211098	+0.0136791	-0.0096666
0.77	-0.08855	+0.0363055	-0.0202403	+0.0130752	-0.0092180
0.78	-0.08580	+0.0348920	-0.0193651	+0.0412411	-0.0087713
0.79	-0.08295	+0.0334565	-0.0184847	+0.0118672	-0.0083268
0.80	-0.08000	+0.0320000	-0.0176000	+0.0112640	-0.0078848
0.81	-0.07695	+0.0305235	-0.0167116	+0.0106620	-0.0074456
0.82	-0.07380	+0.0290280	-0.0158203	+0.0100617	-0.0070096
0.83	-0.07055	+0.0275145	-0.0149266	+0.0094635	-0.0065771
0.84	-0.06720	+0.0259840	-0.0140314	+0.0088678	-0.00[illegible]1484
0.85	-0.06375	+0.0244375	-0.0131352	+0.0082751	-0.0057236
0.86	-0.06020	+0.0228760	-0.0122387	+0.0076859	-0.0053033
0.87	-0.05655	+0.02130[illegible]	-0.0113425	+0.0071004	-0.0048875
0.88	-0.05280	+0.0197120	-0.0104474	+0.0065192	-0.0044765
0.89	-0.04895	+0.0181115	-0.0095538	+0.0059425	-0.0040706
0.90	-0.04500	+0.0165000	-0.0086625	+0.0053708	-0.0036700
0.91	-0.04095	+0.0148785	-0.0077740	+0.0048043	-0.0032750
0.92	-0.03680	+0.0132480	-0.0068890	+0.0042436	-0.0028856
0.93	-0.03255	+0.0116095	-0.0060079	+0.0036889	-0.0025023
0.94	-0.02820	+0.0099640	-0.0051315	+0.0031405	-0.0021250
0.95	-0.02375	+0.0083125	-0.0042602	+0.0025987	-0.0017541
0.96	-0.01920	+0.0066560	-0.0033946	+0.0020639	-0.0013897
0.97	-0.01455	+0.0049955	-0.0025352	+0.0015363	-0.0010319
0.98	-0.00980	+0.0033320	-0.0016827	+0.0010163	-0.0006809
0.99	-0.00495	+0.0016665	-0.0008374	+0.0005041	-0.0003369
1.00	0.00000	0.0000000	0.0000000	+0.0000000	0.0000000

p	L_{-1}^3	L_0^3	L_1^3
0.00	-0.00000	+1.00000	+0.00000
0.01	-0.00495	+0.99990	+0.00505
0.02	-0.00980	+0.99960	+0.01020
0.03	-0.01455	+0.99910	+0.01545
0.04	-0.01920	+0.99840	+0.02080
0.05	-0.02375	+0.99750	+0.02625
0.06	-0.02820	+0.99640	+0.03180
0.07	-0.03255	+0.99510	+0.03745
0.08	-0.03680	+0.99360	+0.04320
0.09	-0.04095	+0.99190	+0.04905
0.10	-0.04500	+0.99000	+0.05500
0.11	-0.04895	+0.98790	+0.06105
0.12	-0.05280	+0.98560	+0.06720
0.13	-0.05655	+0.98310	+0.07345
0.14	-0.06020	+0.98040	+0.07980
0.15	-0.06375	+0.97750	+0.08625
0.16	-0.06720	+0.97440	+0.09280
0.17	-0.07055	+0.97110	+0.09945
0.18	-0.07380	+0.96760	+0.10620
0.19	-0.07695	+0.96390	+0.11305
0.20	-0.08000	+0.96000	+0.12000
0.21	-0.08295	+0.95590	+0.12705
0.22	-0.08580	+0.95160	+0.13420
0.23	-0.08855	+0.94710	+0.14145
0.24	-0.09120	+0.94240	+0.14880
0.25	-0.09375	+0.93750	+0.15625
0.26	-0.09620	+0.93240	+0.16380
0.27	-0.09855	+0.92710	+0.17145
0.28	-0.10080	+0.92160	+0.17920
0.29	-0.10295	+0.91590	+0.18705
0.30	-0.10500	+0.91000	+0.19500
0.31	-0.10695	+0.90390	+0.20305
0.32	-0.10880	+0.89760	+0.21120
0.33	-0.11055	+0.89110	+0.21945
0.34	-0.11220	+0.88440	+0.22780
0.35	-0.11375	+0.87750	+0.23625
0.36	-0.11520	+0.87040	+0.24480
0.37	-0.11655	+0.86310	+0.25345
0.38	-0.11780	+0.85560	+0.26220
0.39	-0.11895	+0.84790	+0.27105
0.40	-0.12000	+0.84000	+0.28000
0.41	-0.12095	+0.83190	+0.28905
0.42	-0.12180	+0.82360	+0.29820
0.43	-0.12255	+0.81510	+0.30745
0.44	-0.12320	+0.80640	+0.31680
0.45	-0.12375	+0.79750	+0.32625
0.46	-0.12420	+0.78840	+0.33580
0.47	-0.12455	+0.77910	+0.34545
0.48	-0.12480	+0.76960	+0.35520
0.49	-0.12495	+0.75990	+0.36505
0.50	-0.12500	+0.75000	+0.37500

p	L^4_{-1}	L^4_0	L^4_1	L^4_2	
0.00	-0.0000000	+1.0000000	+0.0000000	-0.0000000	1.00
0.01	-0.0032835	+0.9949005	+0.0100495	-0.0016665	0.99
0.02	-0.0064680	+0.9896040	+0.0201960	-0.0033320	0.98
0.03	-0.0095545	+0.9841135	+0.0304365	-0.0049955	0.97
0.04	-0.0125440	+0.9784320	+0.0407680	-0.0066560	0.96
0.05	-0.0154375	+0.9725625	+0.0511875	-0.0083125	0.95
0.06	-0.0182360	+0.9665080	+0.0616920	-0.0099640	0.94
0.07	-0.0209405	+0.9602715	+0.0722785	-0.0116095	0.93
0.08	-0.0235520	+0.9538560	+0.0829440	-0.0132480	0.92
0.09	-0.0260715	+0.9472645	+0.0936855	-0.0148785	0.91
0.10	-0.0285000	+0.9405000	+0.1045000	-0.0165000	0.90
0.11	-0.0308385	+0.9335655	+0.1153845	-0.0181115	0.89
0.12	-0.0330880	+0.9264640	+0.1263360	-0.0197120	0.88
0.13	-0.0352495	+0.9191985	+0.1373515	-0.0213005	0.87
0.14	-0.0373240	+0.9117720	+0.1484280	-0.0228760	0.86
0.15	-0.0393125	+0.9041875	+0.1595625	-0.0244375	0.85
0.16	-0.0412160	+0.8964480	+0.1707520	-0.0259840	0.84
0.17	-0.0430355	+0.8885565	+0.1819935	-0.0275145	0.83
0.18	-0.0447720	+0.8805160	+0.1932840	-0.0290280	0.82
0.19	-0.0464265	+0.8723295	+0.2046205	-0.0305235	0.81
0.20	-0.0480000	+0.8640000	+0.2160000	-0.0320000	0.80
0.21	-0.0494935	+0.8555305	+0.2274195	-0.0334565	0.79
0.22	-0.0509080	+0.8469240	+0.2388760	-0.0348920	0.78
0.23	-0.0522445	+0.8381835	+0.2503665	-0.0363055	0.77
0.24	-0.0535040	+0.8293120	+0.2618880	-0.0376960	0.76
0.25	-0.0546875	+0.8203125	+0.2734375	-0.0390625	0.75
0.26	-0.0557960	+0.8111880	+0.2850120	-0.0404040	0.74
0.27	-0.0568305	+0.8019415	+0.2966085	-0.0417195	0.73
0.28	-0.0577920	+0.7925760	+0.3082240	-0.0430080	0.72
0.29	-0.0586815	+0.7830945	+0.3198555	-0.0442685	0.71
0.30	-0.0595000	+0.7735000	+0.3315000	-0.0455000	0.70
0.31	-0.0602485	+0.7637955	+0.3431545	-0.0467015	0.69
0.32	-0.0609280	+0.7539840	+0.3548160	-0.0478720	0.68
0.33	-0.0615395	+0.7440685	+0.3664815	-0.0490105	0.67
0.34	-0.0620840	+0.7340520	+0.3781480	-0.0501160	0.66
0.35	-0.0625625	+0.7239375	+0.3898125	-0.0511875	0.65
0.36	-0.0629760	+0.7137280	+0.4014720	-0.0522240	0.64
0.37	-0.0633255	+0.7034265	+0.4131235	-0.0532245	0.63
0.38	-0.0636120	+0.6930360	+0.4247640	-0.0541880	0.62
0.39	-0.0638365	+0.6825595	+0.4363905	-0.0551135	0.61
0.40	-0.0640000	+0.6720000	+0.4480000	-0.0560000	0.60
0.41	-0.0641035	+0.6613605	+0.4595895	-0.0568465	0.59
0.42	-0.0641480	+0.6506440	+0.4711560	-0.0576520	0.58
0.43	-0.0641345	+0.6398535	+0.4826965	-0.0584155	0.57
0.44	-0.0640640	+0.6289920	+0.4942080	-0.0591360	0.56
0.45	-0.0639375	+0.6180625	+0.5056875	-0.0598125	0.55
0.46	-0.0637560	+0.6070680	+0.5171320	-0.0604440	0.54
0.47	-0.0635205	+0.5960115	+0.5285385	-0.0610295	0.53
0.48	-0.0632320	+0.5848960	+0.5399040	-0.0615680	0.52
0.49	-0.0628915	+0.5737245	+0.5512255	-0.0620585	0.51
0.50	-0.0625000	+0 5625000	+0.5625000	-0.0625000	0.50
	L^4_2	L^4_1	L^4_0	L^4_{-1}	p

CR 2[illegible]

p	L_{-2}	L^5_{-1}	L^5_0	L^5_1	L^5_2
0.00	+0.00000000	0.00000000	1.00000000	0.00000000	0.00000000
0.01	+0.00082908	-0.00659983	+0.99987500	+0.00673317	-0.00083742
0.02	+0.00164934	-0.01306536	+0.99950004	+0.01359864	-0.00168266
0.03	+0.00246028	-0.01939563	+0.99887520	+0.02059537	-0.00253522
0.04	+0.00326144	-0.02558976	+0.99800064	+0.02772224	-0.00339456
0.05	+0.00405234	-0.03164687	+0.99687656	+0.03497813	-0.00426016
0.06	+0.00483254	-0.03756616	+0.99550324	+0.04236184	-0.00513146
0.07	+0.00560158	-0.04334683	+0.99388100	+0.04987217	-0.00600792
0.08	+0.00635904	-0.04898816	+0.99201024	+0.05750784	-0.00688896
0.09	+0.00710448	-0.05448943	+0.98989140	+0.06526757	-0.00777402
0.10	+0.00783750	-0.05985000	+0.98752500	+0.07315000	-0.00866250
0.11	+0.00855768	-0.06506923	+0.98491160	+0.08115377	-0.00955382
0.12	+0.00926464	-0.07014656	+0.98205184	+0.08927744	-0.01044736
0.13	+0.00995798	-0.07508143	+0.97894640	+0.09751957	-0.01134252
0.14	+0.01063734	-0.07987336	+0.97559604	+0.10587864	-0.01223866
0.15	+0.01130234	-0.08452187	+0.97200156	+0.11435313	-0.01313516
0.16	+0.01195264	-0.08902656	+0.96816384	+0.12294144	-0.01403136
0.17	+0.01258788	-0.09338703	+0.96408380	+0.13164197	-0.01492662
0.18	+0.01320774	-0.09760296	+0.9597[illegible]244	+0.14045304	-0.01582026
0.19	+0.01381188	-0.10167403	+0.95520080	+0.14937297	-0.01671162
0.20	+0.01440000	-0.10560000	+0.95040000	+0.15840000	-0.01760000
0.21	+0.01497178	-0.10938063	+0.94536120	+0.16753237	-0.01848472
0.22	+0.01552694	-0.11301576	+0.94008564	+0.17676[illegible]4	-0.01936506
0.23	+0.01606518	-0.11650523	+0.93457460	+0.18610577	-0.02024032
0.24	+0.01658624	-0.11984896	+0.92882944	+0.19554304	-0.02110976
0.25	+0.01708984	-0.12304687	+0.92285156	+0.20507813	-0.02197266
0.26	+0.01757574	-0.12609896	+0.91664244	+0.21470904	-0.02282826
0.27	+0.01804368	-0.12900523	+0.91020360	+0.22443377	-0.02367582
0.28	+0.01849344	-0.13176576	+0.90353664	+0.23425024	-0.02451456
0.29	+0.01892478	-0.13438063	+0.89664320	+0.24415637	-0.02534372
0.30	+0.01933750	-0.13685000	+0.88952500	+0.25415000	-0.02616250
0.31	+0.01973138	-0.13917403	+0.88218380	+0.26422897	-0.02697012
0.32	+0.02010624	-0.14135296	+0.87462144	+0.27439104	-0.02776576
0.33	+0.02046188	-0.14338703	+0.86683980	+0.28463397	-0.02854862
0.34	+0.02079814	-0.14527656	+0.85884084	+0.29495544	-0.02931786
0.35	+0.02111484	-0.14702187	+0.85062656	+0.30535313	-0.03007266
0.36	+0.02141184	-0.14862336	+0.84219904	+0.31582464	-0.03081216
0.37	+0.02168898	-0.15008143	+0.83356040	+0.32636757	-0.03153552
0.38	+0.02194614	-0.15139656	+0.82471284	+0.33697944	-0.03224186
0.39	+0.02218318	-0.15256923	+0.81565860	+0.34765777	-0.03293032
0.40	+0.02240000	-0.15360000	+0.80640000	+0.35840000	-0.03360000
0.41	+0.02259648	-0.15448943	+0.79693940	+0.36920357	-0.03425002
0.42	+0.02277254	-0.15523816	+0.78727924	+0.38006584	-0.03487946
0.43	+0.02292808	-0.15584683	+0.77742200	+0.39098417	-0.03548742
0.44	+0.02306304	-0.15631616	+0.76737024	+0.40195584	-0.03607296
0.45	+0.02317734	-0.15664687	+0.75712656	+0.41297813	-0.03663516
0.46	+0.02327094	-0.15683976	+0.74669364	+0.42404824	-0.03717306
0.47	+0.02334378	-0.15689563	+0.73607420	+0.43516337	-0.03768572
0.48	+0.02339584	-0.15681536	+0.72527104	+0.44632064	-0.03817216
0.49	+0.02342708	-0.15659983	+0.71428700	+0.45751717	-0.03863142
0.50	+0.02343750	-0.15625000	+0.70312500	+0.46875000	-0.03906250

p	L_1^6	L_2^6	L_3^6	
0.00	+0.00000000	-0.00000000	+0.00000000	1.00
0.01	+0.01006608	-0.00250387	+0.00033329	0.99
0.02	+0.02026197	-0.00501433	+0.00066633	0.98
0.03	+0.03058412	-0.00752959	+0.00099887	0.97
0.04	+0.04102892	-0.01004790	+0.00133067	0.96
0.05	+0.05159274	-0.01256746	+0.00166146	0.95
0.06	+0.06227190	-0.01508649	+0.00199101	0.94
0.07	+0.07306272	-0.01760320	+0.00231906	0.93
0.08	+0.08396145	-0.02011576	+0.00264536	0.92
0.09	+0.09496431	-0.02262239	+0.00296967	0.91
0.10	+0.10606750	-0.02512125	+0.00329175	0.90
0.11	+0.11726719	-0.02761053	+0.00361134	0.89
0.12	+0.12855951	-0.03008840	+0.00392821	0.88
0.13	+0.13994058	-0.03255302	+0.00424210	0.87
0.14	+0.15140646	-0.03500257	+0.00455278	0.86
0.15	+0.16295320	-0.03743519	+0.00486001	0.85
0.16	+0.17457684	-0.03984906	+0.00516354	0.84
0.17	+0.18627338	-0.04224232	+0.00546314	0.83
0.18	+0.19803879	-0.04461313	+0.00575857	0.82
0.19	+0.20986902	-0.04695964	+0.00604960	0.81
0.20	+0.22176000	-0.04928000	+0.00633600	0.80
0.21	+0.23370765	-0.05157236	+0.00661753	0.79
0.22	+0.24570785	-0.05383487	+0.00689396	0.78
0.23	+0.25775649	-0.05606568	+0.00716507	0.77
0.24	+0.26984940	-0.05826294	+0.00743064	0.76
0.25	+0.28198242	-0.06042480	+0.00769043	0.75
0.26	+0.29415138	-0.06254943	+0.00794423	0.74
0.27	+0.30635209	-0.06463498	+0.00819183	0.73
0.28	+0.31858033	-0.06667960	+0.00843301	0.72
0.29	+0.33083188	-0.06868147	+0.00866755	0.71
0.30	+0.34310250	-0.07063875	+0.00889525	0.70
0.31	+0.35538796	-0.07254961	+0.00911590	0.69
0.32	+0.36768399	-0.07441224	+0.00932930	0.68
0.33	+0.37998634	-0.07622480	+0.00953524	0.67
0.34	+0.39229074	-0.07798551	+0.00973353	0.66
0.35	+0.40459289	-0.07969254	+0.00992397	0.65
0.36	+0.41688852	-0.08134410	+0.01010639	0.64
0.37	+0.42917335	-0.08293841	+0.01028058	0.63
0.38	+0.44144307	-0.08447367	+0.01044636	0.62
0.39	+0.45369338	-0.08594812	+0.01060356	0.61
0.40	+0.46592000	-0.08736000	+0.01075200	0.60
0.41	+0.47811862	-0.08870754	+0.01089150	0.59
0.42	+0.49028493	-0.08998901	+0.01102191	0.58
0.43	+0.50241465	-0.09120266	+0.01114305	0.57
0.44	+0.51450348	-0.09234678	+0.01125476	0.56
0.45	+0.52654711	-0.09341965	+0.01135690	0.55
0.46	+0.53854126	-0.09441957	+0.01144930	0.54
0.47	+0.55048166	-0.09534486	+0.01153183	0.53
0.48	+0.56236401	-0.09619384	+0.01160434	0.52
0.49	+0.57418404	-0.09696486	+0.01166669	0.51
0.50	+0.58593750	-0.09765625	+0.01171875	0.50
	L_0^6	L_{-1}^6	L_{-2}^6	p

p	L^6_{-2}	L^6_{-1}	L^6_0	
0.00	+0.00000000	-0.00000000	+1.00000000	1.00
0.01	+0.00049579	-0.00493338	+0.99654209	0.99
0.02	+0.00098301	-0.00973369	+0.99283671	0.98
0.03	+0.00146141	-0.01440126	+0.98888645	0.97
0.04	+0.00193077	-0.01893642	+0.98469396	0.96
0.05	+0.00239088	-0.02333957	+0.98026195	0.95
0.06	+0.00284153	-0.02761113	+0.97559318	0.94
0.07	+0.00328253	-0.03175156	+0.97069045	0.93
0.08	+0.00371368	-0.03576136	+0.96555663	0.92
0.09	+0.00413481	-0.03964106	+0.96019466	0.91
0.10	+0.00454575	-0.04339125	+0.95460750	0.90
0.11	+0.00494634	-0.04701252	+0.94879818	0.89
0.12	+0.00533643	-0.05050552	+0.94276977	0.88
0.13	+0.00571588	-0.05387093	+0.93652539	0.87
0.14	+0.00608456	-0.05710945	+0.93006822	0.86
0.15	+0.00644234	-0.06022184	+0.92340148	0.85
0.16	+0.00678910	-0.06320886	+0.91652844	0.84
0.17	+0.00712474	-0.06607133	+0.90945239	0.83
0.18	+0.00744917	-0.06881009	+0.90217669	0.82
0.19	+0.00776228	-0.07142601	+0.89470475	0.81
0.20	+0.00806400	-0.07392000	+0.88704000	0.80
0.21	+0.00835425	-0.07629299	+0.87918592	0.79
0.22	+0.00863298	-0.07854595	+0.87114603	0.78
0.23	+0.00890011	-0.08067987	+0.86292388	0.77
0.24	+0.00915560	-0.08269578	+0.854[illegible]3	0.76
0.25	+0.00939941	-0.08459473	+0.84594727	0.75
0.26	+0.00963151	-0.08637779	+0.83720010	0.74
0.27	+0.00985185	-0.08804607	+0.82828528	0.73
0.28	+0.01006043	-0.08960072	+0.81920655	0.72
0.29	+0.01025723	-0.09104288	+0.80996769	0.71
0.30	+0.01044225	-0.09237375	+0.80057250	0.70
0.31	+0.01061548	-0.09359454	+0.79102481	0.69
0.32	+0.01077694	-0.09470648	+0.78132849	0.68
0.33	+0.01092665	-0.09571085	+0.77148742	0.67
0.34	+0.01106461	-0.09660891	+0.76150554	0.66
0.35	+0.01119087	-0.09740199	+0.75138680	0.65
0.36	+0.01130545	-0.09809142	+0.74113516	0.64
0.37	+0.01140840	-0.09867854	+0.73075462	0.63
0.38	+0.01149978	-0.09916475	+0.72024921	0.62
0.39	+0.01157962	-0.09955143	+0.70962299	0.61
0.40	+0.01164800	-0.09984000	+0.69888000	0.60
0.41	+0.01170498	-0.10003191	+0.68802435	0.59
0.42	+0.01175063	-0.10012861	+0.67706015	0.58
0.43	+0.01178503	-0.10013159	+0.66599152	0.57
0.44	+0.01180828	-0.10004234	+0.65482260	0.56
0.45	+0.01182044	-0.09986238	+0.64355758	0.55
0.46	+0.01182164	-0.09959325	+0.63220062	0.54
0.47	+0.01181195	-0.099[illegible]64[illegible]	+0.62075591	0.53
0.48	+0.01179150	-0.09879368	+0.60922767	0.52
0.49	+0.01176[illegible]40	-0.09826640	+0.59762013	0.51
0.50	+0.01171875	-0.09765625	+0.58593750	0.50
	L^6_3	L^6_2	L^6_1	p

5. Formule van Bessel

We nemen de achterwaartse formule van Gauss en wel voor het basispunt x_1:

$$f(x_1 + ph) = f(x_1) + \binom{p}{1}\delta_{\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{2}\delta_1^2 + \binom{p+1}{3}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \binom{p+2}{4}\delta_1^4 \ldots \quad (2.5.1)$$

Willen wij echter interpoleren voor $x = x_0 + ph$, dan moeten wij in (2.5.1) p vervangen door p-1; immers

$x_1 + (p-1)h = x_0 + ph.$

Wij krijgen dan:

$f(x_0 + ph) =$

$$f(x_1) + \binom{p-1}{1}\delta_{\frac{1}{2}} + \binom{p}{2}\delta_1^2 + \binom{p}{3}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \binom{p+1}{4}\delta_1^4 \ldots . \quad (2.5.2)$$

Wij nemen nu het gemiddelde van (2.4 1) en (2.5 2):

$f(x_0 + ph) =$

$$f(x_0) + f(x_1) + \tfrac{1}{2}\left(\binom{p}{1} + \binom{p-1}{1}\right)\delta_{\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta_0^2 + \delta_1^2) + \tfrac{1}{2}\left(\binom{p}{3} + \binom{p+1}{3}\right)\delta_{\frac{1}{2}}^3$$

$$= f(x_0) + p\delta_{\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta_0^2 + \delta_1^2) + \tfrac{1}{3}(p-\tfrac{1}{2})\binom{p}{2}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \tfrac{1}{2}\binom{p+1}{4}(\delta_0^4 + \delta_1^4) +$$

$$+ \tfrac{1}{5}(p-\tfrac{1}{2})\binom{p+1}{4}\delta_{\frac{1}{2}}^5 + \ldots . \quad (2.5.3)$$

Dit is de z.g. formule van Bessel. Het is een centrale formule. Schrijven we voor de coëfficiënt van de differenties van de k^e orde B_k $(k>1)$ dan ziet de formule er als volgt uit:

$$f(x_0 + ph) = f(x_0) + p\delta_{\frac{1}{2}} + B_2(\delta_0^2 + \delta_1^2) + B_3\delta_{\frac{1}{2}}^3 + B_4(\delta_0^2 + \delta_1^2) + \ldots . \quad (2.5.4)$$

De coëfficiënten B_k zijn getabelleerd, o.a. in "Interpolation & Allied Tables"

6. Formule van Everett

De voorwaartse formule van Gauss was:

$$f(x_0 + ph) = f(x_0) + p\delta_{\frac{1}{2}} + \binom{p}{2}\delta_0^2 + \binom{p+1}{3}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \binom{p+1}{4}\delta_0^4 + \ldots \quad (2.6.1)$$

Men kan nu de differenties van oneven orde uitdrukken in die van even orde door

$$\delta_{\frac{1}{2}}^{2k+1} = \delta_1^{2k} - \delta_0^{2k}.$$

Wij vinden dan:

$$f(x_0 + ph) = f(x_0) + p\delta_{\frac{1}{2}} + (\binom{p}{2} - \binom{p+1}{3})\delta_0^2 + \binom{p+1}{3}\delta_1^2 +$$

$$+ (\binom{p+1}{4} - \binom{p+2}{5}\delta_0^4 + \binom{p+2}{5}\delta_1^4 + \dots \qquad (2.6.2)$$

Door toepassing van $\binom{n}{k} + \binom{n}{k+1} = \binom{n+1}{k+1}$ gaat (2.6.2) over in

$$f(x_0 + ph) = f(x_0) + p\delta_{\frac{1}{2}} - \binom{p}{3}\delta_0^2 + \binom{p+1}{3}\delta_1^2 - \binom{p+1}{5}\delta_0^4 + \binom{p+2}{5}\delta_1^4 + \dots$$

$$= (1-p)f(x_0) + pf(x_1) + E_2\delta_0^2 + F_2\delta_1^2 + E_4\delta_0^4 + F_4\delta_1^4 + \dots \qquad (2.6.3)$$

Dit is de formule van Everett: hierin komen alleen voor differenties voor even orde. De coëfficiënten E_{2k} en F_{2k} zijn getabelleerd o.a. in "Interpolation & Allied Tables"
Een andere notatie is $E_{2k} = E^{2k}_0$, $F_{2k} = E^{2k}_1$.
Moet men interpoleren in een tabel waarbij alleen differenties van even orde zijn gegeven dan gebruikt men de formule van Everett. Heeft men echter geen differenties dan kan men toch beter Everett gebruiken omdat deze minder werk vereist dan Bessel. Is echter de laatste differentie die in rekening gebracht moet worden van even orde, dan kan men gebruiken de Everett formule met een Besselterm. Bruikbare formules zijn dan:

$$f(x_0 + ph) = (1-p)f(x_0) + pf(x_1) = f_0 + p\delta_{\frac{1}{2}}$$

$$f(x_0 + ph) = (1-p)f(x_0) + pf(x_1) + B_2(\delta_0^2 + \delta_1^2)$$

$$f(x_0 + ph) = (1-p)f(x_0) + pf(x_1) + E_2\delta_0^2 + F_2\delta_1^2$$

$$f(x_0 + ph) = (1-p)f(x_0) + pf(x_1) + E_2\delta_0^2 + F_2\delta_1^2 + B_4(\delta_0^4 + \delta_1^4)$$

$$f(x_0 + ph) = (1-p)f(x_0) + pf(x_1) + E_2\delta_0^2 + F_2\delta_1^2 + E_4\delta_0^4 + F_4\delta_1^4.$$

enz.

Voor zowel Bessel- als Everett-coëfficiënten gelden symmetrierelaties:

$$B_{2k}(p) = \tfrac{1}{2}\binom{p+k-1}{2k}$$

$$B_{2k}(1-p) = \tfrac{1}{2}\binom{k-p}{2k} = \tfrac{1}{2}\binom{p+k-1}{2k} = B_{2k}(p)$$

$$B_{2k+1}(p) = \frac{1}{2k+1}(p-\tfrac{1}{2})\binom{p+k-1}{2k}$$

$$B_{2k+1}(1-p) = \frac{1}{2k+1}(\tfrac{1}{2}-p)\binom{k-p}{2k} = -\frac{1}{2k+1}(p-\tfrac{1}{2})\binom{p+k-1}{2k} = -B_{2k+1}$$

Verder gelden:

$E_{2k}(p) = -\binom{p+k-1}{2k+1}$ en $F_{2k}(p) = \binom{p+k}{2k+1}$

en $E_{2k}(1-p) = -\binom{k-p}{2k+1} = \binom{p+k}{2k+1} = F_{2k}(p)$

en ook $F_{2k}(1-p) = E_{2k}(p)$.

Door deze symmetrierelaties hoeft men dus slechts te tabelleren voor $0 \leq p \leq \frac{1}{2}$.

7. Invloed van afrondingen en fouten op differenties

Behalve dat differenties gebruikt kunnen worden in interpolatieformules, kunnen zij grote diensten bewijzen bij het controleren van berekende functiewaarden. Wij hebben gezien dat differenties op een factor na gelijk zijn aan afgeleiden. Deze factor was voor de n^e orde differentie h^n. Wij zien dus dat bij een klein interval h, mits de afgeleiden niet sterk groeien, de differenties afnemen met toenemende orde. Dit zou men inderdaad bij een differentietabel kunnen zien, mits de afrondingsfouten niet aanwezig waren. Deze echter zijn vrijwel altijd aanwezig en hebben een grote invloed op de differenties. Immers denk de afgeronde functiewaarden als som van echte functiewaarde en afrondingsfout. Daar het maken van differenties een lineair proces is mogen we differenties maken van functiewaarden en afrondingsfouten apart. De differenties van de functiewaarden nemen af. De afrondingsfouten echter geven aanleiding tot toenemende differenties: de afrondingsfunctie is allesbehalve glad. Dit ziet men in het volgende voorbeeld:

x	afronding					
0	0,2					
		-0.5				
1	-0.3		1.3			
		0.8		-2.2		
2	0.5		-0.9		2.7	
		-0.1		0.5		-1.8
3	0.4		-0.4		0.9		-2.9
		-0.5		1.4		-4.7
4	-0.1		1.0		-3.8	
		0.5		-2.4		
5	0.4		-1.4			
		0.9				
6	-0.5					

Het ergste dat kan voorkomen is dat de afrondingen afwisselend +0.5 en -0.5 zijn:

0	0.5				
		-1			
1	-0.5		2		
		1		-4	
2	0.5		-2		8
		-1		4	
3	-0.5		2		
		1			
4	0.5				

Wij zien dat in dit geval de k^e differentie in absolute waarde gelijk 2^{k-1} is. Zo erg als hier zal in het de praktijk nooit zijn. Men kan uitgaande van een willekeurige verdeelde afrondingsfunctie de kans berekenen dat een bepaalde differentie een zekere waarde aanneemt. Wij zullen hierop niet verder ingaan.

Wij zullen nu eens nagaan welke invloed een eenheidsfout heeft op de differenties.

$$\begin{array}{ccccccc}
0 & & 0 & & 0 \\
& 0 & & 0 & \\
0 & & 0 & & 1 \\
& 0 & & 1 & \\
0 & & 1 & & -4 \\
& 1 & & -3 & \\
1 & & -2 & & 6 \\
& -1 & & 3 & \\
0 & & 1 & & -4 \\
& 0 & & -1 & \\
0 & & 0 & & 1 \\
& 0 & & 0 & \\
0 & & 0 & & 0
\end{array}$$

Wij zien dat de invloed van de eenheidsfout differenties opleve-rt die op het teken na binomiaal-coëfficiënten zijn.

Dat ze deze gedaante moeten hebben kunnen we inzien als we differenties uitdrukken in functiewaarden.

$$\delta_{\frac{1}{2}} = - f_0 + f_1$$
$$\delta_1^2 = f_0 - 2f_1 + f_2$$
$$\delta_{\frac{3}{2}}^3 = - f_0 + 3f_1 - 3f_2 + f_3$$

en algemeen $\delta_{\frac{k}{2}}^k = (-)^k\binom{k}{0}f_0 + (-)^{k-1}\binom{k}{1}f_1 + (-)^{k-2}\binom{k}{2}f_2 \ldots + f_k$

(2.4.2)

Met behulp van (2.4.2) kan men dan zonder oneven differenties te berekenen, even differenties bepalen.

Het is nu duidelijk hoe de getallen in (2.4.1) ontstaan zijn.

Als toepassing beschouwen wij de volgende tabel:

x	f(x)	δ	δ^2	$\delta^2_{\text{gecorr.}}$
0	61644			
		806		
1	62450		- 10	
		796		
2	63246		- 11	
		785		
3	64031		- 9	- 9
		776		
4	64807		- 36	- 9
		740		
5	65547		+ 45	- 9
		785		
6	66332		- 35	- 8
		750		
7	67082		0	0
		750		
8	67832		- 5	- 5
		745		
9	68577		- 40	- 40
		705		
10	69282		+ 13	
		718		
11	70000		- 7	
		711		
12	70711		- 8	
		703		
13	71414		- 6	
		697		
14	72111			

Wij zien aan de tweede differentie, dat f(5) fout is. De tweede differentie δ_5^2 zal ongeveer - 9 moeten zijn. De fout in f(5) is dan $\frac{45+9}{2} = 27$. De gecorrigeerde f(5) wordt 65574, hetgeen wijst op verwisseling van twee cijfers. Na correctie van f(5) worden de differenties zoals in de vijfde kolom gegeven. Nu blijkt δ_7^2 te hoog te zijn en wel ongeveer 8. Dit wijst op een fout in f(8) van - 8 eenheden: f(8) zou dan 67824 zijn. Echter is ook hier weer blijkbaar sprake van verwisseling, zodat de correctie beter - 9 en f(8) = 67823 is. Op dezelfde wijze vindt men de fout in f(9).

8. Interpolatiecoëfficiënten

Wij zullen in deze paragraaf het gedrag van de coëfficiënten uit de Newton- en Bessel-formules vergelijken. Het is mogelijk om met behulp van functietheorie het gedrag van de coëfficiënten te onderzoeken voor grote waarde van het rangnummer k: dit zullen wij niet doen, maar aan een voorbeeld illustreren wij een en ander. In het volgende tabelletje zijn opgegeven de maximale absolute waarde van de Newton- en Bessel-coëfficiënten met de daarbij behorende waarde van p.

k	$\left\|\binom{p}{k}\right\|_{max}$	p_{max}	$\left\|B_k\right\|_{max}$	p_{max}	$\left\|\delta^k\right\|_{max}$ opdat bijdrage < 0,5
2	0,12500	0,500	0,06850	0,500	4
3	0,06415	0,423	0,00502	0,211 en 0,789	60
4	0,04167	0,382	0,01172	0,500	20
5	0,03026	0,356	0,00087	0,219 en 0,781	500
6	0,02347	0,337	0,00244	0,500	100

Men ziet dat de B_k's veel sneller klein worden dan de $\binom{p}{k}$, waarbij echter bedacht moet worden dat de even B_k's vermenigvuldigd worden met de som van twee differenties Met behulp van de tabel $|B_k|_{max}$ kan men de maximale waarde van de differentie bepalen waarvoor de bijdrage kleiner dan een halve eenheid bedraagt. Differenties kleiner dan δ^k_{max} kan men verwaarlozen.

9. Throwback

Als wij in de formule van Bessel samennemen de termen met tweede en vierde differenties dan hebben wij:

$$\tfrac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta_0^2+\delta_1^2) + \tfrac{1}{2}\binom{p+1}{1}(\delta_0^4+\delta_1^4) = B_2\left\{(\delta_0^2+\delta_1^2) + \frac{1}{12}(p+1)(p-2)(\delta_0^4+\delta_1^4)\right\} \qquad (2.9.1)$$

Beschouwen wij nu eens de coëfficiënt voor de vierde differenties $\frac{1}{12}(p+1)(p-2)$. De maxima van deze functie (voor $0 \leq p \leq 1$) zijn - 0,1667, terwijl het minimum - 0,1875 is. Het gemiddelde is - 0,181. Daar deze functie dus weinig verandert willen wij trachten de functie door een constante C te vervangen. In plaats voor (2.9.1) nemen wij dan

$$B_2\left\{(\delta_0^2+C\delta_0^4) + (\delta_1^2+C\delta_1^4)\right\} \qquad (2.9.2)$$

waarbij wij een fout maken in de coëfficiënt van de vierde differenties die gelijk is aan

$$B_2\left[\frac{1}{12}(p+1)(p-2) - C\right] \qquad (2.9.3)$$

Nu kan men C zo kiezen, dat de fout (2.9.3) extremen heeft die afwisselend van teken en gelijk in absolute waarde zijn. Doet men dit, dan vindt men C = -0,184.

Het maximum van (2.9.3) is - 0,0002, dat is dus 2% van het maximum van B_4. De bijdrage hiervan is dus kleiner dan 0,5 als $|\delta^4| < 1000$.

Wij stellen nu

$$\begin{aligned} \delta^2_{0m} &= \delta^2_0 - 0{,}184\,\delta^4_0 \\ \delta^2_{1m} &= \delta^2_1 - 0{,}184\,\delta^4_1 \end{aligned} \qquad (2.9.4)$$

δ^2_{0m} en δ^2_{1m} heten gewijzigde tweede differenties (modified second differences).

Wij vervangen nu de formule van Bessel tot en met vierde differenties door:

$$f(x_0+pk) = f_{\frac{1}{2}} + p\,\delta_{\frac{1}{2}} + B_2(\delta^2_{0m}+\delta^2_{1m}) + B_3\delta^3_{\frac{1}{2}} \qquad (2.9.5)$$

De vervanging van δ^2 door δ^2_m is dus geoorloofd als $|\delta^4| < 1000$. Deze techniek van het "terugwerpen" van differenties (throwback) is afkomstig van Comrie.

Een dergelijk procédé kan men ook toepassen op hogere differenties. Men kan daarbij één differentie of meer differenties tegelijk wijzigen. Formules zijn:

$$\begin{aligned} \delta^2_m &= \delta^2 - 0{,}184\,\delta^4 + 0{,}038\,\delta^6 & |\delta^4| &< 1000 \\ \delta^4_m &= \delta^4 - 0{,}207\,\delta^6 + 0{,}045\,\delta^8 & |\delta^6| &< 15000 \\ \delta^6_m &= \delta^6 - 0{,}218\,\delta^8 + 0{,}049\,\delta^{10} & |\delta^8| &< 130000 \end{aligned} \qquad (2.9.6)$$

Formules waarbij twee differenties tegelijk gewijzigd worden zijn bijv.

$$\begin{aligned} \delta^2_m &= \delta^2 - 0{,}01312\,\delta^6 + 0{,}0043\,\delta^8 & |\delta^6| &< 300000 \\ \delta^4_m &= \delta^4 - 0{,}27827\,\delta^6 + 0{,}0685\,\delta^8 & \text{en}\quad |\delta^7| &< 30000\,. \end{aligned} \qquad (2.9.7)$$

In moderne tafels worden dikwijls gewijzigde tweede differenties opgegeven. In deze tafels kan men interpoleren met de Everett-formule:

$$f(x_0+ph) = (1-p)f_0 + pf_1 + E_2\delta^2_{0m} + F_2\,\delta^2_{1m} \qquad (2.9.8)$$

Worden gewijzigde differenties opgegeven, dan mag men natuurlijk niet hiervan hogere differenties maken!

Als voorbeeld van een tafel met teruggeworpen δ^4 geven wij een sinustafel in 5 decimalen:

x^0	$\sin x^0$	δ^2	δ^4	δ_m^2
0	.00000	0	0	0
15	.25882	- 1764	121	- 1786
30	.50000	- 3407	231	- 3450
45	.70711	- 4819	329	- 4880
60	.86603	- 5902	402	- 5976
75	.96593	- 6583	450	- 6666
90	1.00000	- 6814	462	- 6899

Tenslotte dit: stel, men heeft gegeven een tabel van bijv. Bessel-coëfficiënten voor p = 0(0,01)1,00 en men moet interpoleren voor p = 0,333. Men zou nu door interpolatie in de coëfficiententabel de waarde van de Bessel-coëfficiënten kunnen bepalen voor p = 0,333 en dan met deze coëfficiënten de gegeven functie interpoleren. De interpolatie in een interpolatiecoëfficiëntentabel zal in het algemeen niet lineair kunnen geschieden (vergelijk Lagrange-coëfficiënten die minstens in gelijke precisie als de te interpoleren functie bekend moeten zijn).

Men doet beter door te interpoleren met twee (of meer) waarden van p, waarvoor men de interpolatie-coëfficiënten kent, en in de dan ontstane fijnere tabel interpoleren voor het gevraagde argument.

In het boven gestelde probleem zou men bijv. interpoleren voor p = 0,33 en p = 0,31. Deze tabel heeft dan een 100 x kleiner interval. Daar de differenties van de k^e orde ongeveer $\frac{1}{k!}h^k.f^{(k)}$ zijn, gaan de k^e differenties in dit geval met een factor 10^{-2k} omlaag. Het zal dikwijls mogelijk zijn om in de geïnterpoleerde tabel lineair te interpoleren.

10. Polynoomopbouw

Moet men voor een aantal aequidistante waarden voor het argument een polynoom berekenen dan kan men dat, gebruik makend van het feit dat een n^e graadspolynoom constante n^e differenties heeft, alleen met optellen en aftrekken doen, als men tenminste startdifferenties bepaald heeft. Dit procédé werkt exact als alle differenties exact gebruikt worden; anders krijgt men opbouw van fouten. In dit geval kan men ook het opbouwen gebruiken, maar dan moet men voor bepaalde waarden het polynoom zelf uitrekenen en contrôleren met het opgebouwde. Men bepaalt dan weer startdifferenties en gaat door tot een volgend contrôlepunt.

Voorbeeld: Gevraagd $4x^3 - 2x + 7$ voor $x = 0(0,1)1$:

x	$10^3 f(x)$			
- 0,2	7368			
		- 172		
- 0,1	7196		- 24	
		- 196		24
0	7000		0	
		- 196		24 start
0,1	6804		24	
		- 172		24
0,2	6632		48	
		- 124		24
0,3	6508		72	
		- 52		
0,4	6456			
		+ 44		
0,5	6500			

11. Inverse interpolatie bij gelijke intervallen

Vroeger (1.7) hebben wij een methode voor invers interpoleren behandeld, nl. het verwisselen van argument en functie. Doet men dit dan heeft men geen voordeel van een aequidistante tabel. Men kan echter anders te werk gaan. Wij illustreren dit aan de formule van Bessel:

$$f(x_0+ph) = f(x_0) + p\delta_{\frac{1}{2}} + B_2(\delta_0^2+\delta_1^2) + B_3\delta_{\frac{1}{2}}^{\,3} + \dots \qquad (2.11.1)$$

$f(x_0+ph)$ is gegeven en (2.11.1) stelt een vergelijking voor waaruit p bepaald moet worden; is p bekend dan ook x_0+ph. Om een benadering p_1 voor p te vinden bepalen wij

$$p_1 = \frac{f(x_0+ph) - f(x_0)}{\delta_{\frac{1}{2}}} \qquad (2.11.2)$$

Met p_1 bepalen wij $B_2(p_1)$, $B_3(p_1)$ enz. en bepalen

$$p_2 = \frac{f(x_0+ph) - f(x_0) - B_2(p_1)(\delta_0^2+\delta_1^2) - B_3(p_1)\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \dots}{\delta_{\frac{1}{2}}} \qquad (2.11.3)$$

en vervolgens bepalen wij $B_2(p_2)$, $B_3(p_2)$ enz. Men zal zien dat na een paar iteraties de bijdrage

$$B_2(p_i)(\delta_0^2+\delta_1^2) + B_3(p_i)\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \dots$$

niet meer verandert: men heeft dan p gevonden.

Heeft men twee machines ter beschikking dan zet men in het resultaat-werk van de ene, bijv. linker machine $f(x_0+ph)$ en in dat van de rechter $f(x_0)$ met $\delta_{\frac{1}{2}}$ in het instelwerk. Men draait nu aan de rechter machine totdat de beide resultaat-werken gelijk zijn: het omwentelingswerk van de rechter machine geeft dan p_1. Men zoekt nu op de coëfficiënten $B_i(p_1)$ en telt in de linker machine op $-B_2(p_1)(\delta_0^2+\delta_1^2) - B_3(p_1)\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \ldots$; daarna draait men weer aan de rechter machine totdat wederom de resultaat-werken gelijk zijn: het omwentelingswerk van de rechter machine geeft dan p_2. Zoek weer coëfficiënten op enz.

III. Numerieke differentiatie

1. Inleiding

Eerder hebben wij gezien dat tussen de k^e differenties en de k^e afgeleiden van een functie een nauw verband bestaat. Het zal dan ook mogelijk blijken $f^k(x)$ uit te drukken in een reeks van differenties, te beginnen bij de k^e.

Nu hebben wij vroeger gezien welke de invloed is van afronding van de functiewaarden op de differenties. Het is dus duidelijk dat hogere afgeleiden numeriek slechts met grote onnauwkeurigheid bepaald kunnen worden. Hierbij komt de volgende moeilijkheid. Naarmate men het interval van een tabel kleiner maakt, worden ook de differenties kleiner: bij het maken van differenties vallen cijfers weg. Om dit te vermijden kan men het interval groter nemen. Te groot kan niet omdat dan de hieronder af te leiden reeksen niet meer convergeren. Men moet dus een compromis trachten te vinden.

Beter is het, als het probleem het toelaat, numerieke differentiatie te vermijden.

2. Afleiding van enkele formules voor numerieke differentiatie

Bij numerieke differentiatie gaat men uit van het interpolerende polynoom en differentieert dat.
Wij nemen bijv. een formule van Newton.

$$f(x_0+ph) = f(x) + \binom{p}{1}\Delta_0 + \binom{p}{2}\Delta_0^2 + \binom{p}{3}\Delta_0^3 + \binom{p}{4}\Delta_0^4 + \ldots \qquad (3.2.1)$$

Nu willen wij kennen $f'(x)$. Nu is gesteld $x = x_0 + ph$, dus

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} = \frac{df(x)}{dp} \cdot \frac{dp}{dx} = \frac{1}{h}\,\frac{df(x)}{dp} .$$

$$\frac{d}{dp}\binom{p}{1} = 1$$

$$\frac{d}{dp}\binom{p}{2} = \frac{d}{dp}\ \tfrac{1}{2}p(p-1) = p-\tfrac{1}{2}$$

$$\frac{d}{dp}\binom{p}{3} = \frac{d}{dp}\ \frac{1}{6}p(p-1)(p-2) = \frac{1}{6}(3p^2-6p+2)$$

$$\frac{d}{dp}\binom{p}{4} = \frac{d}{dp}\ \frac{1}{24}p(p-1)(p-2)(p-3) = \frac{1}{24}(4p^3-18p^2+22p-6).$$

Wij vinden dus:

$$h.f'(x_0+ph) = \Delta_0 + (p-\tfrac{1}{2})\Delta_0^2 + \frac{1}{6}(3p^2-6p+2)\Delta_0^3 + \\ + \frac{1}{24}(4p^3-15p^2+22p-6)\Delta_0^4 + \ldots \qquad (3.2.2)$$

Nogmaals differentierend komt er:

$$h^2\ f''(x_0+ph) = \Delta_0^2 + (p-1)\Delta_0^3 + \frac{1}{12}(6p^2-18p+11)\Delta_0^4 + \ldots \qquad (3.2.3)$$

en $$h^3\ f'''(x_0+ph) = \Delta_0^3 + \tfrac{1}{2}(2p-3)\Delta_0^4 + \ldots\ . \qquad (3.2.4)$$

Willen wij de afgeleide kennen voor $x=x_0$, dus $p=0$, dan vinden wij

$$h\ f_0' = \Delta_0 - \tfrac{1}{2}\Delta_0^2 + \frac{1}{3}\Delta_0^3 - \frac{1}{4}\Delta_0^4 + \ldots \qquad (3.2.5)$$

$$h^2 f_0'' = \Delta_0^2 - \Delta_0^3 + \frac{11}{12}\Delta_0^4 + \ldots \qquad (3.2.6)$$

$$h^3 f_0''' = \Delta_0^3 - \frac{3}{2}\Delta_0^4 + \ldots \qquad (3.2.7)$$

Dergelijke formules kan men ook opstellen uitgedrukt in teruglopende differenties.
Centrale formules kan men afleiden door b.v. uit te gaan van de formule van Bessel:

$$f(x_0+ph) = f(x_0) + p\delta_{\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta_0^2+\delta_1^2) + \frac{1}{3}(p-\tfrac{1}{2})\binom{p}{2}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \tfrac{1}{2}\binom{p+1}{4}(\delta_0^4+\delta_1^4) + \ldots \qquad (3.2.8)$$

Men vindt:

$$h\ f'(x_0+ph) = \delta_{\frac{1}{2}} + \frac{2p-1}{4}(\delta_0^2+\delta_1^2) + \frac{1}{12}(6p^2-6p+1)\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \frac{1}{48}(4p^3-6p^2-2p+2) \\ (\delta_0^4+\delta_1^4) \qquad (3.2.9)$$

Stelt men $p=\frac{1}{2}$, dus differentiatie halverwege het interval dan:

$$h\ f'_{\frac{1}{2}} = \delta_{\frac{1}{2}} - \frac{1}{24}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \ldots \qquad (3.2.10)$$

Het blijkt dat de coefficienten van de even differenties, indien men een oneven aantal malen differentieert, nul zijn. Wenst men de afgeleide echter te kennen op de basispunten zelf dus p=0 dan komt er:

$$h f'_o = \delta_{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{4}(\delta_o^2+\delta_1^2) + \frac{1}{12}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \frac{1}{24}(\delta_o^4+\delta_1^4). \qquad (3.2.11)$$

hetgeen men gemakkelijk herleidt tot:

$$h f_o' = \tfrac{1}{2}(\delta_{-\frac{1}{2}}+\delta_{\frac{1}{2}}) - \frac{1}{12}(\delta_{-\frac{1}{2}}^3+\delta_{\frac{1}{2}}^3) + \ldots \qquad (3.2.12)$$

waarvoor men indien men stelt

$$\mu\delta_n^{2k+1} = \tfrac{1}{2}(\delta_{n-\frac{1}{2}}^{2k+1} + \delta_{n+\frac{1}{2}}^{2k+1}). \qquad (3.2.13)$$

kan schrijven:

$$h f_o' = \mu\delta_o - \frac{1}{6}\mu\delta_o^3 + \ldots \qquad (3.2.14)$$

waarin wederom even differenties ontbreken, zij het ten koste van het invoeren van gemiddelde differenties.

3.3. Formules.

Voorwaartse formules.

$$\begin{aligned} h f'_o &= \Delta_o - \tfrac{1}{2}\Delta_o^2 + \tfrac{1}{3}\Delta_o^3 - \tfrac{1}{4}\Delta_o^4 + \tfrac{1}{5}\Delta_o^5 \ldots \\ h^2 f''_o &= \Delta_o^2 - \Delta_o^3 + \tfrac{11}{12}\Delta_o^4 - \tfrac{5}{6}\Delta_o^5 + \tfrac{137}{180}\Delta_o^6 \ldots \\ h^3 f'''_o &= \Delta_o^3 - \tfrac{3}{2}\Delta_o^4 + \tfrac{7}{4}\Delta_o^5 - \tfrac{15}{8}\Delta_o^6 + \tfrac{29}{15}\Delta_o^7 \ldots \end{aligned} \qquad (3.3.1)$$

Achterwaartse formules.

$$\begin{aligned} h f_o' &= \nabla_o + \tfrac{1}{2}\nabla_o^2 + \tfrac{1}{3}\nabla_o^3 + \tfrac{1}{4}\nabla_o^4 + \tfrac{1}{5}\nabla_o^5 + \ldots \\ h f_o'' &= \nabla_o^2 + \nabla_o^3 + \tfrac{11}{12}\nabla_o^4 + \tfrac{5}{6}\nabla_o^5 + \tfrac{137}{180}\nabla_o^6 + \ldots \\ h^3 f_o''' &= \nabla_o^3 + \tfrac{3}{2}\nabla_o^4 + \tfrac{7}{4}\nabla_o^5 + \tfrac{15}{5}\nabla_o^6 + \tfrac{29}{15}\nabla_o^7 + \ldots \end{aligned} \qquad (3.3.2)$$

Centrale formules.

$$\begin{aligned} h f_o' &= \mu\delta_o - \tfrac{1}{6}\mu\delta_o^3 + \tfrac{1}{30}\mu\delta_o^5 - \ldots \\ h^2 f_o'' &= \delta_o^2 - \tfrac{1}{12}\delta_o^4 + \tfrac{1}{90}\delta_o^6 - \ldots \\ h^3 f_o''' &= \mu\delta_o^3 - \tfrac{1}{4}\mu\delta_o^5 + \tfrac{7}{120}\delta_o^7 - \ldots \\ h^4 f_o^{iv} &= \delta_o^4 - \tfrac{1}{6}\delta_o^6 + \tfrac{7}{240}\delta_o^8 - \ldots \end{aligned} \qquad (3.3.3)$$

$$\begin{aligned} h f_{\frac{1}{2}}' &= \delta_{\frac{1}{2}} - \tfrac{1}{24}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \tfrac{3}{640}\delta_o^5 - \ldots \\ h^2 f_{\frac{1}{2}}'' &= \mu\delta_{\frac{1}{2}}^2 - \tfrac{5}{24}\mu\delta_{\frac{1}{2}}^4 + \tfrac{259}{560}\mu\delta_{\frac{1}{2}}^6 - \ldots \\ h^3 f_{\frac{1}{2}}''' &= \delta_{\frac{1}{2}}^3 - \tfrac{1}{8}\delta_{\frac{1}{2}}^5 + \tfrac{37}{1920}\delta_o^7 - \ldots \\ h^4 f_{\frac{1}{2}}^{iv} &= \mu\delta_{\frac{1}{2}}^4 - \tfrac{7}{24}\mu\delta_{\frac{1}{2}}^6 + \tfrac{47}{640}\mu\delta_{\frac{1}{2}}^8 - \ldots \end{aligned} \qquad (3.3.4)$$

4. Vergelijking en formules

Zoals men direct ziet convergeren de centrale-formules veel beter dan de voorwaartse of de achterwaartse. Zo mogelijk zal men dus centrale-formules gebruiken. Tevens ziet men d t de formules waarin echte, dus geen gemiddelde differenties optreden het snelst convergeren. Men zal dus bij voorkeur (3.3.3.2) en (3.3.4.1) gebruiken. Wil men een oneven afgeleide op de basispunten berekenen, dan kan men, door de functie niet op de gevraagde punten, maar halverwege te bepalen, van de snel convergente formules (3.3.4) gebruik maken. Men zal in deze paragrafen over differentiatie restterm schattingen gemist hebben. Dat deze niet gegeven zijn, ligt hieraan, dat bij differentiatie de precisie niet zozeer bepaald wordt door de restterm dan wel door het wegvallen van cijfers bij het maken van de differenties, zodat een restterm schatting op zichzelf niet veel informatie omtrent de fout geeft.

IV. Numerieke integratie

1. Inleiding

In de analyse wordt de integraal van een functie gedefinieerd als de limiet van een som van producten van functiewaarden en intervallengten. Het zal blijken, dat tegevolge van het sommeren van functiewaarden bij numerieke integratie, in tegenstelling tot het vormen van differenties bij differentiatie, de afrondingsfouten enigszins vereffend worden in plaats van geaccentueerd. Het procédé van numerieke integratie (mechanische kwadratuur) wordt dan ook veel toegepast o.a. bij het integreren van differentiaalvergelijkingen.

2. Trapeziumformule en formule van Simpson

Afleiding van integratieformules kan geschieden door een interpolatieformule te integreren. Wij nemen bijv. de formule van Newton:

$$f(x_0+ph) = f_0 + p\Delta_0 + h^2\binom{p}{2}f''(\xi) \qquad (4.2.1)$$

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x_0+ph)\,dx = \int_0^1 f(x_0+ph)\,h\,dp = \qquad (4.2.2)$$
$$= h\left[f_0 + \tfrac{1}{2}\Delta_0 + \frac{h^2}{2}\int_0^1 p(p-1)f''(\xi)\,dp\right]$$

ξ is een onbekende functie van p. De restintegraal in (4.2.2) kunnen wij dus niet direct berekenen. Wel kunnen wij gebruik maken van de middelwaarde stelling uit de integraalrekening:

Als f(x) en g(x) continue functies zijn voor $a \leq x \leq b$ en g(x) tekenvast is, dan geldt

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx \qquad (4.2\ 3)$$

met $a \leq \xi \leq b$.

In onze integraal is $g = p(p-1)$ en blijkbaar is g tekenvast: wij kunnen dus schrijven:

$$\frac{h^2}{2}\int_0^1 p(p-1)\ f''(\xi)dp = \frac{h^2}{2}\ f''(\xi_1)\int_0^1 p(p-1) = -\frac{h^2}{12}\ f''(\xi_1) \quad (4.2.4)$$

De integratie formule gaat dan over in:

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x_0+ph)dx = \frac{h}{2}(f_0+f_1) - \frac{h^3}{12}\ f''(\xi) \qquad (4.2.5)$$

Dit is de zg. <u>trapezium-regel</u>, tenminste als men de restterm $\frac{-h^2}{12}\ f''(\xi)$ verwaarloost. De fout is dus van de orde h^2 en is natuurlijk nul voor lineaire functie f(x).

Wij nemen nu een term meer, dus wij nemen het kwadratische interpolerende polynoom en integreren dat van x_0 tot x_0+2h:

$$f(x_0+ph) = f_0 + p\Delta_0 + \binom{p}{2}\Delta_1^2 + h^3\binom{p}{3}f'''(\xi) \qquad (4.2.6)$$

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} f(x_0+ph)dx = \int_0^2 f(x_0+ph)hdp =$$

$$h\left[2f_0 + 2\Delta_0 + \frac{1}{3}\Delta_0^2 + \frac{h^3}{6}\int_0^2 p(p-1)(p-2)f'''(\xi)\ dp \qquad (4.2.7)\right.$$

Om de restintegraal te berekenen kunnen wij niet direct de middelwaarde stelling toepassen: de factor p(p-1)p-2) wisselt van teken. Om een (ruwe) indruk van de integraal te krijgen beschouwen wij:

$$\int_0^1 p(p-1)(p-2)f'''(\xi) + \int_1^2 p(p-1)(p-2)f'''(\xi) \qquad (4.2.8)$$

Op ieder van de integralen kunnen wij de middelwaarde stelling toepassen:

$$f'''(\xi_1)\int_0^1 p(p-1)(p-2)dp + f'''(\xi_2)\int_1^2 p(p-1)(p-2)dp =$$

$$\frac{1}{4}\left\{f'''(\xi_1) - f'''(\xi_2)\right\} \qquad (4.2.9)$$

Als f(x) een vierde afgeleide heeft kunnen wij met de middelwaarde stelling der differentiaalrekening vinden

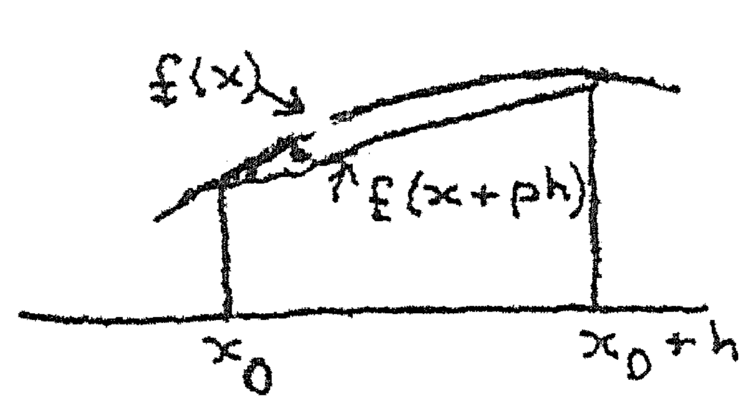
$$\left|\int_0^2 p(p-1)(p-2)f'''(\xi)dp\right| \leq \tfrac{1}{2}h \left|f^{IV}(\xi)\right| \qquad (4.2.10)$$

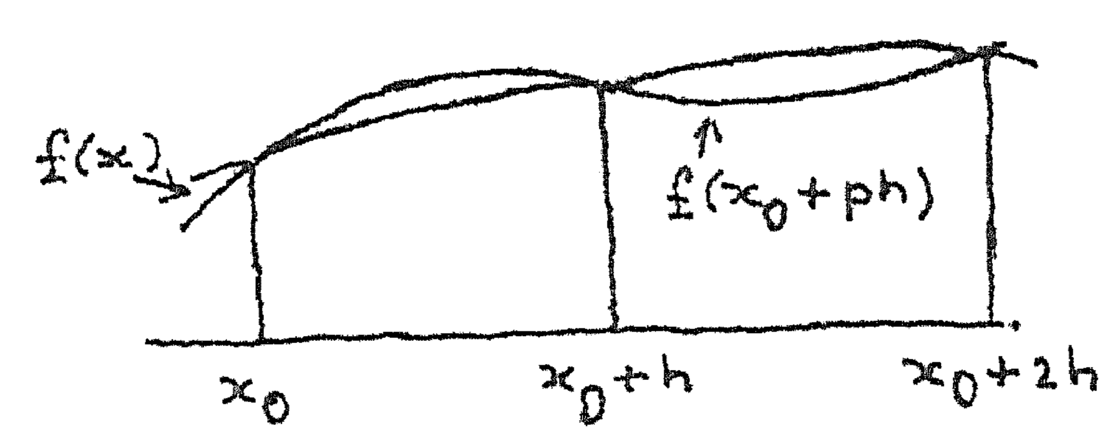
daar $|\xi_1 - \xi_2| \leq 2h$ is.

Zo vinden wij als schatting van de absolute waarde van de fout $\frac{h^4}{12} f^{IV}(\xi)$. Nauwkeuriger analyse geeft echter voor de restterm $-\frac{h^4}{90} f^{IV}(\xi)$, zodat de <u>formule van Simpson</u> met restterm is:

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} f(x_0+ph)dx = \frac{h}{3}(f_0+4f_1+f_2) - \frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi) \qquad (4.2.11)$$

Blijkens de vorm van de restterm is deze formule exact als f(x) een polynoom van de 3e graad is, terwijl het interpolerende polynoom waarvan wij uitgingen kwadratisch was. Dit is dus een meevaller! De achtergrond hiervan is gemakkelijk in te zien. Laten wij eerst beschouwen de trapezium-regel. Deze levert het oppervlak van het getekende





trapezium; de fout is het oppervlak van het sikkeltje. Hebben wij drie punten x_0, x_0+h, x_0+2h, dan wisselt de fout tegevolge van het gebruik van de interpolatieformule van teken: de fout in de integratie is het verschil van de oppervlakken van de twee sikkeltjes. Men kan dus a priori verwachten dat integratieformules met een oneven aantal punten een kleinere fout geven. Neemt men vier punten dan vindt men de $\frac{3}{8}$ - regel:

$$\int_{x_0}^{x_0+3h} f(x_0+ph)dx = \frac{3h}{8}(f_0+3f_1+3f_2+f_3) - \frac{3h^5}{80} f^{IV}(\xi) \qquad (4.2.12)$$

met een fout van dezelfde orde als bij Simpson, en wel schijnbaar groter. Immers stel wij willen een functie over een bepaald interval integreren. Bij Simpson wordt het interval gehalveerd, dit is h. De fout in de integraal is dan $-\frac{1}{90}h^5 f^{IV}(\xi)$.

Bepalen wij dezelfde integraal met de $\frac{3}{8}$ - regel, dan moet het interval in drieën gedeeld worden; het interval in de integratie is dus $\frac{2}{3}$ maal dat bij Simpson. De fout is dus:

$$- \frac{3}{80} \left(\frac{2}{3}\right)^5 h^5 f\ (\xi) = - \frac{4}{810} h^5 f\ (\xi)$$

tegen $- \frac{9}{810} h^5 f\ (\xi)$ bij Simpson: de fout is dus een factor twee kleiner geworden.

Formules analoog aan (4.2.5), (4.2.11), (4.2.12) zg. Newton-Cotes formules kan men opstellen voor meer punten. Het blijkt dan echter dat de coëfficiënten bij 9 punten ook negatief worden: dit geeft verlies van cijfers en van precisie. Het is dan ook bete beter om als over een lang interval geïnterpoleerd moet worden de trapeziumformule of de formule van Simpson meermalen toe te passen:

$$\int_{x_0}^{x_0+nh} f(x_0+ph) = h(\tfrac{1}{2}f_0+f_1+f_2+ \ldots +f_{n-1}+\tfrac{1}{2}f_n) - \frac{n}{12}h^3 f''(\xi) \qquad (4.2.13)$$

en

$$\int_{x_0}^{x_0+2nh} f(x_0+ph) = \frac{h}{3}(f_0+4f_1+2f_2+4f_3+2f_4+ \ldots +4f_{2n-2}+2f_{2n-1}+f_{2n}) - $$
$$- \frac{n}{90} h^5 f^{IV}(\xi). \qquad (4.2.14)$$

(4.2 14) is alleen te gebruiken bij een even aantal intervallen. Is het aantal oneven, dan kan men over het laatste drietal bijv. de $\frac{3}{8}$ - regel nemen; men kan het laatste interval halveren en hierop Simpson toepassen.

Kent men de vierde afgeleide van $f(x)$ niet, dan kan men als volgt een schatting van de fout krijgen, gemaakt bij integratie volgens Simpson. Stel wij willen integreren:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \ .$$

Kies een h, zodat $x_0+2nh = x_1$ en bereken met deze h de integraal, het antwoord zij I_1; doe hetzelfde met $\frac{h}{2}$ met antwoord I_2. Dan is

$$I_1 = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \frac{n}{90} h^5 f\ (\xi_1) \qquad (4.2.15)$$

$$I_2 = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \frac{2n}{90} \left(\frac{h}{2}\right)^5 f\ (\xi_2) \qquad (4.2.16)$$

Stel nu dat $f^{IV}(x)$ niet veel verandert en stel $f^{IV}(\xi_1) = f^{IV}(\xi_2)$. Dan is

$$I_1 - I_2 = \frac{nh^5}{90} f^{IV}(\xi_2)(1 - \frac{1}{16}) = \frac{15}{16} \frac{nh^5}{90} f^{IV}(\xi_2) \qquad (4.2.17)$$

Een schatting van de fout $\int_{x_0}^{x} f(x)dx - I_2$ is dus $-\frac{1}{15}(I_1-I_2)$.
Door dit in rekening te brengen kan men het resultaat verbeteren.

3. Integratie met behulp van differenties

In (IV.2) hebben wij enkele zg. gesloten integratieformules afgeleid. Zij heten gesloten, omdat erin voorkomen alleen functiewaarden, die liggen in het interval waarover geïntegreerd wordt. Een ander type formules krijgt men bijv. als men interpolatiereeksen onbepaald integreert. Wij gaan nu uit van de formule van Newton:

$$f(x_0+ph) = f_0 + \binom{p}{1}\Delta_0 + \binom{p}{2}\Delta_0^2 + \binom{p}{3}\Delta_0^3 + \binom{p}{4}\Delta_0^4 + \binom{p}{5}\Delta_0^5 + \dots$$

of

$$f(x_0+ph) = f_0 + p\Delta_0 + (\tfrac{1}{2}p^2-\tfrac{1}{2}p)\Delta_0^2 + (\tfrac{1}{6}p^3-\tfrac{1}{2}p^2+\tfrac{1}{3}p)\Delta_0^3 + \qquad (4.3.1)$$

$$+ (\tfrac{1}{24}p^4-\tfrac{1}{4}p^3+\tfrac{11}{24}p^2-\tfrac{1}{4}p)\Delta_0^4 + (\tfrac{1}{120}p^5-\tfrac{1}{12}p^4+\tfrac{7}{24}p^3-\tfrac{1}{12}p^2+\tfrac{1}{5}p)\Delta_0^5 + \dots$$

Wij schrijven voor x_0+ph, x_p en integreren onbepaald naar p:

$$\frac{1}{h}\int^{x_p} f(x)dx = C + f_0(p+a_0) + \Delta_0(\tfrac{1}{2}p^2+a_1) + \Delta_0^2(\tfrac{1}{6}p^3-\tfrac{1}{4}p^2+a_2) + \qquad (4.3.2)$$

$$+\Delta_0^3(\tfrac{1}{24}p^4-\tfrac{1}{6}p^3+\tfrac{1}{6}p^2+a_3) + \Delta_0^4(\tfrac{1}{120}p^5-\tfrac{1}{16}p^4+\tfrac{11}{72}p^3-\tfrac{1}{8}p^2+a_4) + \dots$$

In een onbepaalde enkelvoudige integraal kan slechts één constante optreden. Wij zullen dus de a_i moeten bepalen, dan blijft C over als enige constante. Voor C schrijven wij nu de eerste somfunctie Δ_0^{-1}, die zoals wij van vroeger weten op een constante na bepaald is. Om nu de a_i te bepalen, gaan wij als volgt te werk: (4.3.2) is opgeschreven voor basispunt x_0. Wij kunnen de formule ook opschrijven voor x_1 en wel door alle indices met één te verhogen en p door p-1 te vervangen. Wij krijgen dan:

$$\frac{1}{h}\int^{x_p} f(x)dx = \Delta_1^{-1} + f_1((p-1)+a_0) + \Delta_1(\tfrac{1}{2}(p-1)^2+a_1) + \Delta_1^2(\tfrac{1}{6}(p-1)^3-$$

$$-\tfrac{1}{4}(p-1)^2+a_2) + \Delta_1^3(\tfrac{1}{24}(p-1)^4-\tfrac{1}{6}(p-1)^3+\tfrac{1}{6}(p-1)^2+a_3) + \qquad (4.3.3)$$

$$+\Delta_1^4(\tfrac{1}{120}(p-1)^5-\tfrac{1}{16}(p-1)^4+\tfrac{11}{72}(p-1)^3-\tfrac{1}{8}(p-1)^2+a_4) + \dots$$

Vervolgens drukken wij alles uit in functiewaarden en differenties van x_0:

$\Delta_1^{-1} = \Delta_0^{-1} + f_0$

$f_1 = f_0 + \Delta_0$

$\Delta_1 = \Delta_0 + \Delta_0^2$

enz.

dus:

$$\frac{1}{h}\int^{x_p} f(x)dx = \Delta_0^{-1} + f_0((p-1)+a_0+1) + \Delta_0(\tfrac{1}{2}(p-1)^2+a_1+(p-1)+a_0) +$$

$$\Delta_0^2(\tfrac{1}{6}(p-1)^3-\tfrac{1}{4}(p-1)^2+a_2+\tfrac{1}{2}(p-1)^2+a_1) + \Delta_0^3(\tfrac{1}{24}(p-1)^4-\tfrac{1}{6}(p-1)^3+\tfrac{1}{6}(p-1)^2+$$

$$+a_3+\tfrac{1}{6}(p-1)^3-\tfrac{1}{4}(p-1)^2+a_2) + \Delta_0^4(\tfrac{1}{120}(p-1)^5-\tfrac{1}{16}(p-1)^4+\tfrac{11}{72}(p-1)^3-\tfrac{1}{8}(p-1)^2+$$

$$a_4+\tfrac{1}{24}(p-1)^4-\tfrac{1}{6}(p-1)^3+\tfrac{1}{6}(p-1)^2+a_3) + \ldots$$

$$= \Delta_0^{-1} + f_1(p+a_0) + \Delta_0(\tfrac{1}{2}p^2-\tfrac{1}{2}+a_0+a_1) + \Delta_0^2(\tfrac{1}{6}p^3-\tfrac{1}{4}p^2+\tfrac{1}{12}+a_1+a_2) +$$

$$\Delta_0^3(\tfrac{1}{24}p^4-\tfrac{1}{6}p^3+\tfrac{1}{6}p^2-\tfrac{1}{24}+a_2+a_3) + \Delta_0^4(\tfrac{1}{120}p^5-\tfrac{1}{16}p^4+\tfrac{11}{72}p^3-\tfrac{1}{8}p^2+\tfrac{19}{720}+a_3+a_4)\ldots \tag{4.3.4}$$

Nu moet (4.3.4) gelijk zijn aan (4.3.2), dus:

$a_0 = \frac{1}{2}$

$a_1 = -\frac{1}{12}$

$a_2 = \frac{1}{24}$

$a_3 = -\frac{19}{720}$

a_4 blijkt te worden $\frac{3}{160}$.

De formule wordt dus:

$$\frac{1}{h}\int^{x_p} f(x)dx = \Delta_0^{-1} + (p+\tfrac{1}{2})f_0 + (\tfrac{1}{2}p^2-\tfrac{1}{12})\Delta_0 + (\tfrac{1}{6}p^3-\tfrac{1}{4}p^2+\tfrac{1}{24})\Delta_0^2 +$$

$$(\tfrac{1}{24}p^4-\tfrac{1}{6}p^3+\tfrac{1}{6}p^2-\tfrac{19}{720})\Delta_0^3 + (\tfrac{1}{120}p^5-\tfrac{1}{16}p^4+\tfrac{11}{72}p^3-\tfrac{1}{8}p^2+\tfrac{3}{160})\Delta_0^4 + \ldots \tag{4.3.5}$$

Integreren wij tot x_0, dus $p = 0$ dan komt er:

$$\frac{1}{h}\int^{x_0} f(x)dx = \Delta_0^{-1} + \tfrac{1}{2}f_0 - \tfrac{1}{12}\Delta_0 + \tfrac{1}{24}\Delta_0^2 - \tfrac{19}{720}\Delta_0^3 + \tfrac{3}{160}\Delta_0^4 - \ldots \tag{4.3.6}$$

Het is natuurlijk ook mogelijk om de achterwaartse Newton-formule te integreren op analoge wijze. Men vindt dan

$$\frac{1}{h}\int^{x_0} f(x)dx = \nabla_0^{-1} - \tfrac{1}{2}f_0 - \frac{1}{12}\nabla_0 - \frac{1}{24}\nabla_0^2 - \frac{19}{720}\nabla_0^3 - \frac{3}{160}\nabla_0^4 + \ldots \tag{4.3.7}$$

Willen wij nu bepalen $\int_{x_i}^{x_k} f(x)dx$ dan vinden wij gebruik makend van (4.3.6)

$$\frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_k} f(x)dx = \frac{1}{h}\left\{\int^{x_k} f(x)dx - \int^{x_i} f(x)dx\right\} =$$

$$(\Delta_k^{-1} - \Delta_i^{-1}) + \tfrac{1}{2}(f_k - f_i) - \frac{1}{12}(\Delta_k - \Delta_i) + \frac{1}{24}(\Delta_k^2 - \Delta_i^2) - \frac{19}{720}(\Delta_k^3 - \Delta_i^3) + $$
$$+ \frac{3}{160}(\Delta_k^4 - \Delta_i^4) - \ldots \tag{4.3.8}$$

Nu is $\Delta_k^{-1} = f_{k-1} + \Delta_{k-1}^{-1} = f_{k-1} + f_{k-2} + \ldots + f_i$

en

$$\frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_k} f(x)dx = \tfrac{1}{2}f_i + f_{i+1} + f_{i+2} + \ldots + f_{k-1} + \tfrac{1}{2}f_k - \frac{1}{12}(\Delta_k - \Delta_i)$$
$$+ \frac{1}{24}(\Delta_k^2 - \Delta_i^2) - \frac{19}{720}(\Delta_k^3 - \Delta_i^3) + \frac{3}{160}(\Delta_k^4 - \Delta_i^4) - \ldots \tag{4.3.9}$$

Wij hebben hier dus gevonden de trapeziumformule met differentie-correcties.

Wij konden echter ook (4.3.6) en (4.3.7) gebruiken:

$$\frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_k} f(x)dx = \frac{1}{h}\left\{\int^{x_l} f(x)dx - \int^{x_i} f(x)dx\right\}$$

waarbij wij nu $\int^{x_k} f(x)dx$ met (4.3;7) en $\int^{x_i} f(x)dx$ met (4.3.6) bepalen, dus

$$\frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_k} f(x)dx = (\nabla_k^{-1} - \tfrac{1}{2}f_k - \frac{1}{12}\nabla_k - \frac{1}{24}\nabla_k^2 - \frac{19}{720}\nabla_k^3 - \frac{3}{160}\nabla_k^4 - \ldots)$$
$$- (\Delta_i^{-1} + \tfrac{1}{2}f_i - \frac{1}{12}\Delta_i + \frac{1}{24}\Delta_i^2 - \frac{19}{720}\Delta_i^3 + \frac{3}{160}\Delta_i^4 - \ldots) \tag{4.3.8}$$

$\nabla_k^{-1} = \nabla_{k-1}^{-1} + f_k$ en dus:

$$\nabla_k^{-1} = f_k + f_{k-1} + \ldots + f_{i+1} + \nabla_i^{-1} = f_k + f_{k-1} + \ldots +$$
$$f_{i+1} + f_i + \Delta_i^{-1}$$

(4.3.8) wordt dan:

$$\frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_k} f(x)dx = \tfrac{1}{2}f_i + f_{i+1} + f_{i+2} + \dots + f_{k-1} + \tfrac{1}{2}f_k -$$

$$\frac{1}{12}(\nabla_k - \Delta_i) - \frac{1}{24}(\nabla_k^2 + \Delta_i^2) - \frac{19}{720}(\nabla_k^3 - \Delta_i^3) - \frac{3}{160}(\nabla_k^4 + \Delta_i^4) - \dots \quad (4.3.9)$$

Dit is de integratieformule van Gregory. Hierin komen alleen voor differenties die betrekking hebben op functiewaarden uit het integratieinterval. Verwaarloost men de differentiecorrecties dan krijgt men de trapeziumregel terug.

Nemen wij $k = i+2$ dan komt er

$$\frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx = \tfrac{1}{2}f_i + f_{i+1} + \tfrac{1}{2}f_{i+2} - \frac{1}{12}(f_{i+2} - f_{i+2} - f_{i+1} + f_i)$$

$$- \frac{1}{24}(2f_{i+2} - 4f_{i+1} + 2f_i) = \frac{1}{3}f_{i+2} + \frac{4}{3}f_{i+1} + \frac{1}{3}f_i$$

dus de formule van Simpson.

4.4 Centrale integratieformules

Om centrale formules af te leiden gaan wij uit van (4.3.5) en drukken de daarin voorkomende voorwaartse differenties uit in centrale:

$$\Delta_0^{-1} = \delta_{\frac{1}{2}}^{-1} - f_0$$

$$\Delta_0^0 = \delta_0^0 = f_0$$

$$\Delta_0 = \delta_{\frac{1}{2}}$$

$$\Delta_0^2 = \delta_0^2 + \delta_{\frac{1}{2}}^3$$

$$\Delta_0^3 = \delta_{\frac{1}{2}}^3 + \delta_0^4 + \delta_{\frac{1}{2}}^5$$

$$\Delta_0^4 = \delta_0^4 + 2\delta_{\frac{1}{2}}^5 + \delta_0^6 + \delta_{\frac{1}{2}}^7$$

Deze resultaten gesubstitueerd in (4.3.5) geven:

$$\frac{1}{h}\int^{x_p} f(x)dx = \delta_{\frac{1}{2}}^{-1} + (p-\tfrac{1}{2})f_0 + (\tfrac{1}{2}p^2 - \frac{1}{12})\,\delta_{\frac{1}{2}} +$$

$$+ (\frac{1}{6}p^3 - \frac{1}{4}p^2 + \frac{1}{24})\,\delta_0^2 + (\frac{1}{24}p^4 - \frac{1}{12}p^2 + \frac{11}{720})\,\delta_{\frac{1}{2}}^3 +$$

$$(\frac{1}{120}p^5 - \frac{1}{48}p^4 - \frac{1}{72}p^3 + \frac{1}{24}p^2 - \frac{11}{1440})\,\delta_0^4 + \dots \quad (4.4.1)$$

Stel weer p = 0:

$$\frac{1}{h}\int^{x_0} f(x)dx = \delta_{\frac{1}{2}}^{-1} - \tfrac{1}{2}f_0 - \frac{1}{12}\delta_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{24}\delta_0^2 + \frac{11}{720}\delta_{\frac{1}{2}}^3 - \frac{11}{1440}\delta_0^4 + \dots \tag{4.4.2}$$

Nu geldt $\delta_{\frac{1}{2}}^{2n-1} - \tfrac{1}{2}\delta_0^{2n} = \mu\,\delta_0^{2n-1}$ (4.4.3)

Dus (4.4.2) gaat over in:

$$\frac{1}{h}\int^{x_0} f(x)dx = \mu\,\delta_0^{-1} - \frac{1}{12}\mu\delta_0 + \frac{11}{720}\mu\delta_0^3 - \dots \tag{4.4.4}$$

Stelt men in (4.4.1) $p = \frac{1}{2}$ dan vindt men:

$$\frac{1}{h}\int^{x_{\frac{1}{2}}} f(x)dx = \delta_{\frac{1}{2}}^{-1} + \frac{1}{24}\delta_{\frac{1}{2}} - \frac{17}{5760}\delta_{\frac{1}{2}}^3 + \dots . \tag{4.4.5}$$

Wij hebben dus weer hetzelfde als bij differentieren: formules met echte differenties als men halverwege integreert, anders gemiddelde differenties ook hier convergeert de reeks met de echte differenties het snelst.

4.5 Dubbele integratie

Moet men bepalen $\int^x dt \int^t f(s)ds$ dan kan men een formule afleiden door (4.3.5) nogmaals te integreren op dezelfde manier als bij de afleiding van(4.3.5)zelf. Men moet daarbij de tweede somfunctie invoeren en krijgt een formule in voorwaartse differenties. Door deze weer uit te drukken in centrale differenties kan men afleiden:

$$\frac{1}{h^2}\int^{x_0} dt \int^t f(s)ds = \delta_0^{-2} + \frac{1}{12}f_0 - \frac{1}{240}\delta_0^2 + \dots \tag{4.5.1}$$

$$\frac{1}{h^2}\int^{x_{\frac{1}{2}}} dt \int^t f(s)ds = \mu\,\delta_{\frac{1}{2}}^{-2} - \frac{1}{24}\mu f_{\frac{1}{2}} + \frac{17}{1920}\mu\delta_{\frac{1}{2}}^2 \tag{4.5.2}$$

4.6. Gauss-type integratie formules

Tot nu toe hebben wij integratie - formules behandeld, waarin gebruikt werden functiewaarden (of differenties daarvan) voor aequidistante argumenten. Wij zullen nu deze eis laten vallen. Stel gevraagd $\int_a^b f(x)dx$. Wij transformeren het interval $a \leftrightarrow b$ tot $-1 \leftrightarrow +1$ door te stellen

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}t \ .$$

De integraal wordt dan $\frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f(t)dt$.

Wij willen nu deze integraal aldus schrijven:

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = \sum_{1}^{n} w_k f(t_k) \qquad (4.6.1)$$

In het rechterlid van (4.6.1) komen voor 2n onbekenden w_k en t_k. Wij kunnen dus om deze te bepalen 2n eisen opstellen. Deze eisen kunnen luiden: kies de w_k en t_k zo, dat (4.6.1) exact is voor alle polynomen met graad $\leq$ 2n-1. Men krijgt dan 2n betrekkingen waaruit w_k en t_k dienen te worden bepaald.

Het stelsel vergelijkingen wordt:

$$\begin{aligned} 2 &= w_1 + w_2 + \ \ldots + w_n \\ 0 &= w_1t_1 + w_2t_2 + \ldots + w_nt_n \\ \frac{2}{3} &= w_1t_1^2 + w_2t_2^2 + \ldots + w_nt_n^2 \\ &\quad \cdot \ \cdot \ \cdot \ \cdot \ \cdot \\ &\quad\ \ \cdot \ \cdot \ \cdot \\ &\quad\quad \cdot \end{aligned} \qquad (4.6.2)$$

Als voorbeeld nemen wij n=2. De vergelijkingen worden

$$\begin{aligned} 2 &= w_1 + w_2 \\ 0 &= w_1t_1 + w_2t_2 \\ \frac{2}{3} &= w_1t_1^2 + w_2t_2^2 \\ 0 &= w_1t_1^3 + w_2t_2^2 \end{aligned}$$

met als oplossingen $t_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $t_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$$w_1 = 1, \qquad w_2 = 1$$

Wij vinden dus

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \qquad (4.6.3)$$

Deze formule is exact als f een polynoom is van de graad 0,1,2 of 3.

Keren wij terug tot het stelsel (4.6.2):

$$
\begin{aligned}
a_1 &= w_1 + w_2 + \ldots\ldots + w_n \\
a_2 &= w_1 t_1 + w_2 t_2 + \ldots\ldots + w_n t_n \\
a_3 &= w_1 t_1^2 + w_2 t_2^2 + \ldots\ldots + w_n t_n^2 \\
&\cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \\
&\cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \\
a_{2n} &= w_1 t_1^{2n-1} + w_2 t_2^{2n-1} + \ldots\ldots\ w_n t_n^{2n-1}
\end{aligned}
\qquad (4.6.4)
$$

waarbij voor de linkerleden a_i geschreven is. De te bepalen t_k zijn op te vatten als nulpunten van een polynoom van de graad n:

$$
t^n + b_1 t^{n-1} + b_2 t^{n-2} + \ldots\ldots + b_n \qquad (4.6.5)
$$

Vermenigvuldig de eerste vergelijking van (4.6.4) met b_n, de tweede met b_{n-1}, enz. tot en met de n^e en tel dit op. Men vindt dan:

$$
a_1 b_n + a_2 b_{n-1} + \ldots\ldots + a_n b_1 + a_{n+1} = 0
$$

Vervolgens vermenigvuldigen wij de tweede vergelijking met b_n enz. Wij krijgen dan het stelsel:

$$
\begin{aligned}
&a_1 b_n + a_2 b_{n-1} + \ldots\ldots + a_n b_1 + a_{n+1} = 0 \\
&a_2 b_n + a_3 b_{n-1} + \ldots\ldots + a_{n+1} b_1 + a_{n+2} = 0 \\
&\cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \\
&\cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \\
&a_n b_n + a_{n+1} b_{n-1} + \ldots\ldots + a_{2n-1} b_1 + a_{2n} = 0
\end{aligned}
\qquad (4.6.6)
$$

Uit (4.6.6) kan men b_i oplossen; daarna vindt men t_i als nulpunten van (4.6.5) en tenslotte w_i uit het eerste n-tal vergelijkingen van (4.6.4).

Op deze wijze bepalen we voor het voorbeeld $n = 2$ t_1, t_2, w_1, w_2.

$$
\begin{aligned}
2 &= w_1 + w_2 \\
0 &= w_1 t_1 + w_2 t_2 \\
\tfrac{2}{3} &= w_1 t_1^2 + w_2 t_2^2 \\
0 &= w_1 t_1^3 + w_2 t_2^3
\end{aligned}
$$

(4.6.6) wordt in dit geval: $2b_2 + 0\ b_1 + \frac{2}{3} = 0$

$$
0b_2 + \tfrac{2}{3}\ b_1 + 0 = 0
$$

dus $b_2 = -\frac{1}{3}$, $b_1 = 0$ en $t_{1,2}$ voldoen aan $t^2 - \frac{1}{3} = 0$,

dus $\begin{cases} t_1 = \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ t_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \end{cases}$

en

$$2 = w_1 + w_2 \quad \text{geeft tenslotte}$$
$$0 = w_1 - w_2$$
$$w_1 = w_2 = 1$$

Op dergelijke wijze kan men meer-punts Gauss-formules afleiden. Bewezen kan worden dat alle t_i en w_i reeel zijn en $|t_i| < 1$.

In het bovenstaande hebben wij aan t_i en w_i geen beperkingen gesteld. Men kan echter ook alle t_i geven. Dan vinden wij n lineaire vergelijkingen voor w_i door de voorwaarde te stellen dat de integratieformule exact is voor polynomen van graad $\leq n-1$. Nemen we bovendien de t_i aequidistant, dan volgen de formules van het type Newton Cotes, b.v. de formule van Simpson:

$$x_1 = -1,\ x_2 = 0,\ x_1 = 1$$

(4.6.2) wordt:
$$\begin{aligned} 2 &= w_1 + w_2 + w_3 \\ 0 &= -w_1 + w_3 \\ \tfrac{2}{3} &= w_1 + w_3 \end{aligned}$$

dus $w_1 = w_3 = \frac{1}{3}$

$w_2 = \frac{4}{3}$ en

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = \frac{1}{3}\left\{f(-1) + 4f(0) + f(1)\right\}.$$

Men kan ook de verhouding der gewichten w_i geven. De eerste vergelijking van (4.6.2) geeft dan de w_i en uit de volgende niet lineaire n vergelijkingen moet men t_i oplossen.

In dit geval is men niet zeker van de realiteit der t_i hetgeen men aan het volgende voorbeeld ziet:

n=2:
$$\begin{aligned} 2 &= w_1 + w_2 \\ 0 &= w_1t_1 + w_2t_2 \\ \frac{2}{3} &= w_1t_1^2 + w_2t_2^2 \end{aligned}$$

$w_2 = w_1$ dan volgt $t_1 = \sqrt{\frac{\alpha}{3}}$, $t_2 = -\sqrt{\frac{1}{3\alpha}}$, $w_1 = \frac{2}{1+\alpha}$, $w_2 = \frac{2\alpha}{1+\alpha}$

Dus als $\alpha < 0$ vindt men zuiver imaginaire waarden voor t_i, hetgeen begrijpelijk moeilijkheden voor de berekening van $f(t_i)$ oplevert.

Ook kan men enkele t_i geven, b.v. -1 en +1. Dan vindt men een formule die exact is voor polynomen met graad $\leq 2n-3$

4.7 Toepassingen

In deze paragraaf behandelen wij enkele voorbeelden van integratie van functies die hetzij zelf oneindig worden in het integratie-interval, hetzij een oneindige eerste of hogere afgeleide hebben.

Allereerst willen wij bepalen $\int_0^1 \sqrt{x}dx$. Tabelleert men $\sqrt{x}$ in 5 decimalen met een interval 0.1 en past men Simpson toe dan vindt men .66402 i.p.v. .66667. Maakt men differenties dan is de bron van de fout duidelijk: in de buurt van 0 zijn de differenties groot en polynoombenadering geeft een grote fout: de eerste afgeleide is immers oneindig groot in 0.

Om deze singulariteit te verwijderen stellen wij $x = y^2$.

$\sqrt{x} = y$; $dx = 2ydy$ en wij krijgen:

$$\int_0^1 \sqrt{x}dx = \int_0^1 2y^2 dy.$$

Afgezien van het feit dat deze integraal direct te berekenen is, zien wij dat de integrand nu geen singulariteit meer vertoont.

Als volgend voorbeeld bepalen wij $\int_0^1 e^{-x}\sqrt{x}dx$.

Past men direct Simpson toe dan vindt men .37633

x	$e^{-x}\sqrt{x}$	$(e^{-x}-1)\sqrt{x}$	$e^{-y^2}y^2$
0	.00000	.00000	.00000
0.1	.28613	-.03010	.00990
0.2	.36615	-.08016	.03843
0.3	.40576	-.14196	.08225
0.4	.42395	-.20851	.13634
0.5	.42888	-.27823	.19470
0.6	.42511	-.34949	.25116
0.7	.41547	-.42059	.30019
0.8	.40189	-.49254	.33747
0.9	.38571	-.56297	.36033
1.0	.36788	-.63212	.36788

terwijl het antwoord moet zijn .378945

Hier gedraagt de integrand zich in de buurt van $x = 0$ als $\sqrt{x}(1 - x + \frac{x^2}{2!} \ldots\ldots)$ dus als $\sqrt{x}$. Wij hebben dus dezelfde singulariteit als boven. Wij kunnen echter ook de eerste term van de reeksontwikkeling van e^{-x} aftrekken:

$$\int_0^1 e^{-x}\sqrt{x}dx = \int_0^1 (e^{-x} - 1)\sqrt{x}dx + \int_0^1 \sqrt{x}dx$$

$(e^{-x} - 1)\sqrt{x}$ gedraagt zich als $x\sqrt{x}$ en heeft dus een eindige eerste afgeleide, de hogere zijn nog oneindig. De tweede integraal bepaalt men analytisch, de eerste met Simpson; men vindt .37898. Door meer termen af te trekken kan men de singulariteit verzwakken.

Geheel elimineren kan men hen door te stellen $x = y^2$.

Wij vinden $\int_0^1 e^{-x}\sqrt{x}dx = 2\int_0^1 e^{-y^2}y^2dy$

Bepalen wij deze integraal direct met Simpson dan vinden wij .378944.

Vervolgens willen wij bepalen $\int_0^1 \sqrt{1 - x^2}dx$.

De integrand is hier singulier in $x = 1$. Om deze singulariteit te verzwakken schrijven wij:

$\sqrt{1 - x^2} = \sqrt{1 + x}\,\sqrt{1 - x}$ en ontwikkelen $\sqrt{1 + x}$ om $x = 1$:

$$\sqrt{1 + x} = \sqrt{2 - (1 - x)} = \sqrt{2}\left(1 - \frac{1 - x}{2}\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{2}\left(1 - \frac{1 - x}{4} + \ldots\right)$$

$$\sqrt{1 - x^2} = \sqrt{2(1 - x)}\left(1 - \frac{1 - x}{4} + \ldots\right).$$

Als wij dan van de integrand $\sqrt{1 - x^2}$ aftrekken $\sqrt{2(1 - x)}$ dan gedraagt de integrand zich bij $x = 1$ als $(1 - x)\sqrt{1 - x}$. De singulariteit is dus verzwakt.

$\int_0^1 \sqrt{2(1 - x)}dx$ wordt analytisch bepaald.

Geheel elimineren van de singulariteit gaat door toepassen van de transformatie

$x = \sin\theta$; $\sqrt{1 - x^2} = \cos\theta$; $dx = \cos\theta\, d\theta$.

Dus: $\int_0^1 \sqrt{1 - x^2}dx = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2\theta\, d\theta$.

x	$\sqrt{1-x^2}$	$\sqrt{1-x^2}-\sqrt{2(1-x)}$	θ	$\cos^2\theta$
0	1.00000	-.41421	0°	1.00000
.1	.99499	-.34665	10°	.96985
.2	.97980	-.28511	20°	.88302
.3	.95394	-.22928	30°	.75000
.4	.91652	-.17893	40°	.58682
.5	.86603	-.13397	50°	.41318
.6	.80000	-.09443	60°	.25000
.7	.71414	-.06046	70°	.11698
.8	.60000	-.03246	80°	.03015
.9	.43589	-.01132	90°	0
1.0	0	0		

De antwoorden met de verschillende methoden zijn

$$\int_0^1 \sqrt{1-x^2}\,dx = .78175$$

$$\int_0^1 \left(\sqrt{1-x^2} - \sqrt{2(1-x)}\right)dx + \int_0^1 \sqrt{2(1-x)}\,dx = -.157426 + .942809 = .785383$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^2\theta\, d\theta = \int_0^{60^\circ} \cos^2\theta\, d\theta + \int_{60^\circ}^{90^\circ} \cos^2\theta\, d\theta = .785376$$

$$\int_0^1 \sqrt{1-x^2}\,dx = \pi/4 = .785398.$$

Wil men bepalen $\int_0^x \cos x \ln x dx$ dan kan men de logarithmische singulariteit verwijderen door partiele integratie:

$$\int_0^x \cos x \ln x dx = \int_0^x \ln x \, d \sin x = \ln x \sin x - \int_0^x \frac{\sin x}{x} dx$$

Tenslotte geven wij een constructie van een speciale Gauss-formule.

Stel wij willen bepalen $\int_0^{0.2} e^{-x}\sqrt{x}dx$.

Wij kunnen dit doen door op het boven gegeven tabelletje Simpson toe te passen. Wij vinden dan 0.05036 terwijl het juiste antwoord is 0.0529587.

Wij kunnen echter ook een speciale Gauss-formule maken. Daartoe transformeren wij eerst het interval 0 - 0.2 tot -1 +1 door

$$x = \frac{y+1}{10}$$

$$\int_0^{0.2} e^{-x}\sqrt{x}dx = \frac{1}{10^{3/2}} \int_{-1}^{1} e^{-\frac{y+1}{10}} \sqrt{1+y}\, dy.$$

Ons doel is nu een formule te maken dat

$$\int_{-1}^{1} f(y)\sqrt{1+y}\,dy = \sum_{1}^{n} W_x(y_x) \qquad \text{bij gegeven n exact is voor}$$

een polynoom f(y) van zo hoog mogelijke graad. Het probleem is dus gelijk aan dat van 4.6 met dien verstande dat daar in plaats van $\sqrt{1+y}$ een 1 stond.
Zoals in 4.6. bepalen we a_i die ditmaal zijn:

$$a_1 = \int_{-1}^{1} \sqrt{1+y}\,dy = \frac{4}{3}\sqrt{2}$$

$$a_2 = \int_{-1}^{1} y\sqrt{1+y}\,dy = \frac{4}{15}\sqrt{2}$$

$$a_3 = \int_{-1}^{1} y^2\sqrt{1+y}\,dy = \frac{44}{105}\sqrt{2}$$

enz.

Wij nemen nu n = 3 en $f(y) = e^{-\frac{y+1}{10}}$ en kiezen $y_1 = -1$; $y_2 = 0$; $y_3 = 1$: dit komt dus overeen met $x_1 = 0$; $x_2 = 0.1$; $x_3 = 0.2$, de basispunten die gebruikt worden in de Simpson-formule.
Het stelsel (4.6.4) wordt nu:

$$\frac{4}{3}\sqrt{2} = w_1 + w_2 + w_3$$

$$\frac{4}{15}\sqrt{2} = -w_1 + w_3$$

$$\frac{44}{105}\sqrt{2} = w_1 + w_3$$

en dus $w_1 = \frac{8}{105}\sqrt{2}$; $w_2 = \frac{96}{105}\sqrt{2}$; $w_3 = \frac{36}{105}\sqrt{2}$

en wij vinden $\int_0^{0.2} e^{-x}\sqrt{x}\,dz = \frac{1}{10^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{8\sqrt{2}}{105}e^0 + \frac{4}{15}\sqrt{2}e^{0.1} + \frac{44}{105}\sqrt{2}\,e^{0.2}\right) = 0.0529580.$

Op dergelijke wijze kan men natuurlijk voor allerlei gewichtsfuncties zoals hier voor $\sqrt{1+y}$ Gauss-formules maken.

5. Oplossen van vergelijkingen

5.1 Inleiding

In dit hoofdstuk zal behandeld worden het oplossen van vergelijkingen met één onbekende. In de volgende twee paragrafen worden procédés gegeven die van toepassing zijn voor het oplossen van willekeurige vergelijkingen. Daarna worden methoden behandeld ter oplossing van algebraische vergelijkingen.

5.2 Regula Falsi

Laat gevraagd zijn te bepalen een nulpunt van $f(x)$.
Door (ruwe) tabellering bepaalt men twee punten x_1 en x_2 zodat $f(x_1).f(x_2) < 0$.

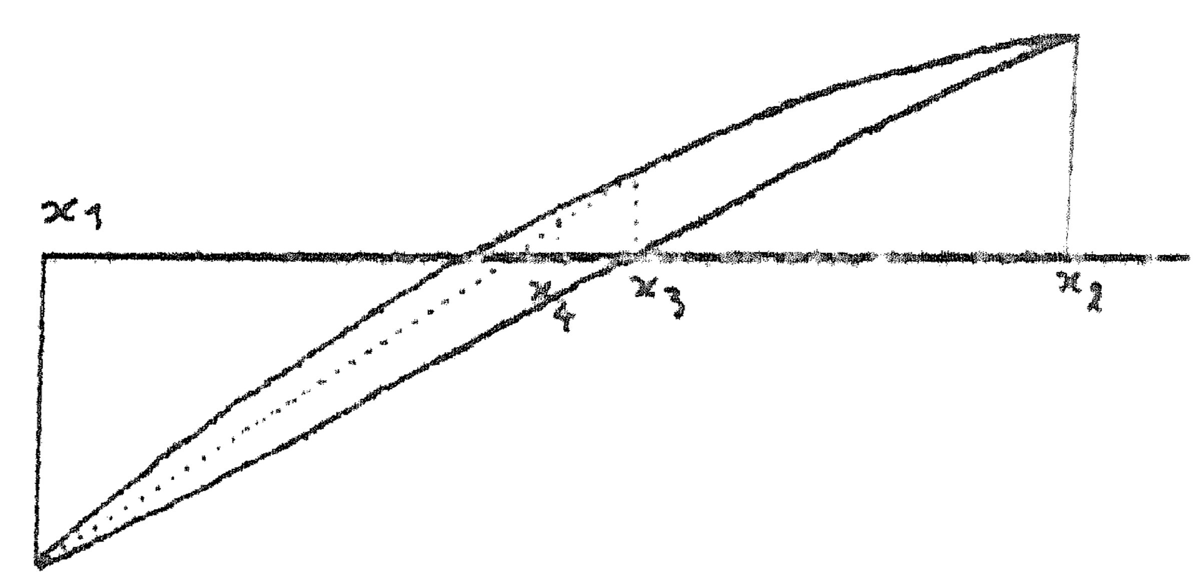
Het procédé van de "regula falsi" bestaat hierin dat men de koorde door (x_1,f_1) en (x_2f_2) toetst en deze snijdt met de x-as: het snijpunt zij x_3. Nu zijn er drie mogelijkheden:

1. $f(x_1).f(x_3) = 0$ dan is het nulpunt gevonden.
2. $f(x_1).f(x_3) < 0$ dan past men op x_1 en x_3 het procédé toe.
3. $f(x_1).f(x_3) > 0$ dan past men op x_2 en x_3 het procédé toe.

In formule luidt de regula falsi:

$$x_3 = x_2 - \frac{x_2 - x_1}{f_2 - f_1} f_2 \; . \tag{5.2.1}$$

Dit procédé convergeert tot een nulpunt α van $f(x)$ zodat $x_1 < \alpha < x_2$



v.b. $f(x) = x^3 - 6x^2 + 11x - 6 = (x - 1)(x - 2)(x - 3)$

n	x_n	f_n	n	x_n	f_n
1	1.5	.375	7	1.982	.018
2	2.5	-1.125	8	1.990	.010
3	1.75	.234	9	1.994	.006
4	1.879	.119	10	1.997	.003
5	1.938	.062	11	1.998	.002
6	1.967	.033	12	1.999	.001

Om een indruk te krijgen van de snelheid van de convergentie beschouwen wij de fout in de (n+1)e iteratie:

$$x_{n+1} - \alpha = x_n - \alpha - \frac{x_n - x_{n-1}}{f_n - f_{n-1}}$$

Wij ontwikkelen f_n en f_{n-1} in een Taylorreeks $x = \alpha$, daarbij bedenkend dat $f(\alpha) = 0$:

$$f_n = (x_n - \alpha)f'(\alpha) + \tfrac{1}{2}(x_n - \alpha)^2 f''(\alpha) + \ldots.$$
$$f_{n-1} = (x_{n-1} - \alpha)f'(\alpha) + \tfrac{1}{2}(x_{n-1} - \alpha)^2 f''(\alpha) + \ldots.$$

en hieruit vinden we

$$f_n - f_{n-1} = (x_n - x_{n-1})\left\{f'(\alpha) + \tfrac{1}{2}(x_n + x_{n-1} - 2\alpha)f''(\alpha) + \dots\right\}$$

dus $\dfrac{f_n - f_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} = f'(\alpha) + \tfrac{1}{2}(x_n + x_{n-1} - 2\alpha)f''(\alpha) + \dots$

voor $\dfrac{x_n - x_{n-1}}{f_n - f_{n-1}}$ vinden we dan:

$$\frac{x_n - x_{n-1}}{f_n - f_{n-1}} = \frac{1}{f'(\alpha)}\left\{1 + \tfrac{1}{2}(x_n + x_{n-1} - 2\alpha)\frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} + \dots\right\}^{-1} =$$

$$= \frac{1}{f'(\alpha)}\left\{1 - \tfrac{1}{2}(x_n + x_{n-1} - 2\alpha)\frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} + \dots\right\}$$

en tenslotte $x_{n+1} - \alpha = (x_n - \alpha)(x_{n-1} - \alpha)\dfrac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} + \dots$

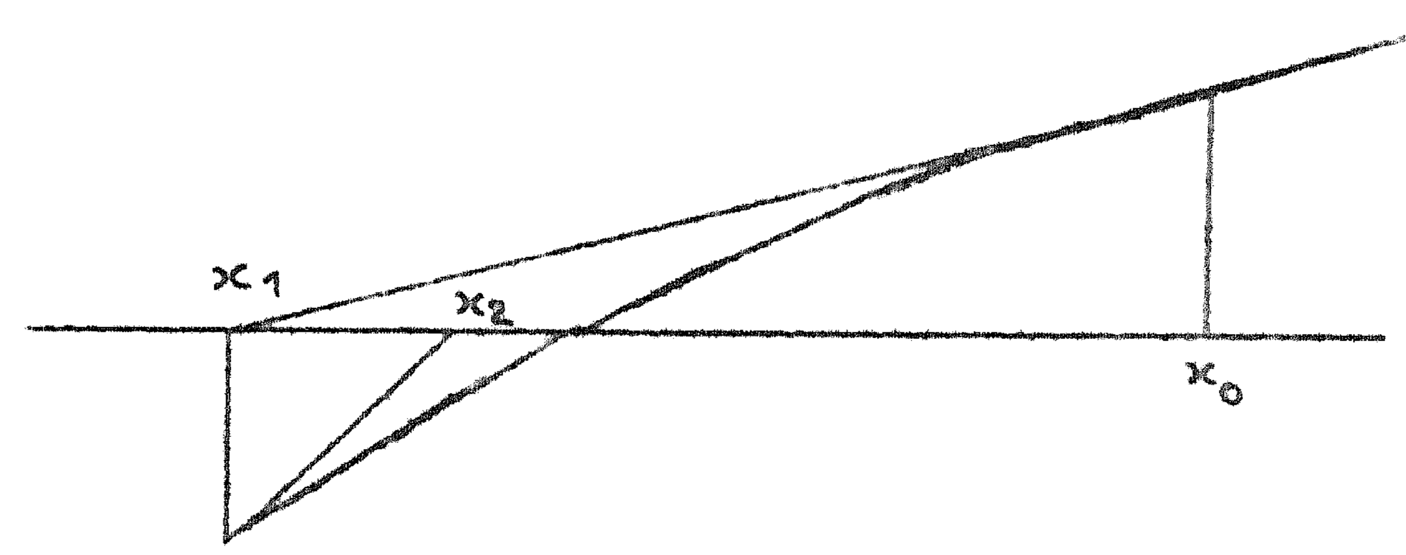
Stelt men $x_{n+1} - \alpha = c.(x_n - \alpha)^p$ d.w.z. is de nieuwe fout de p^e macht van de oude dan vindt men voor p de vergelijking

$$p^2 - p - 1 = 0 \quad \text{dus} \quad p = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1.6$$

5.3 Formule van Newton

Bij gebruik van de iteratieformule van Newton gaat men uit van een schatting van het nulpunt, trekt de raaklijn aan de kromme, snijdt deze met de as. Het snijpunt is de tweede schatting: hiermee gaat men verder.

De iteratieformule luidt:

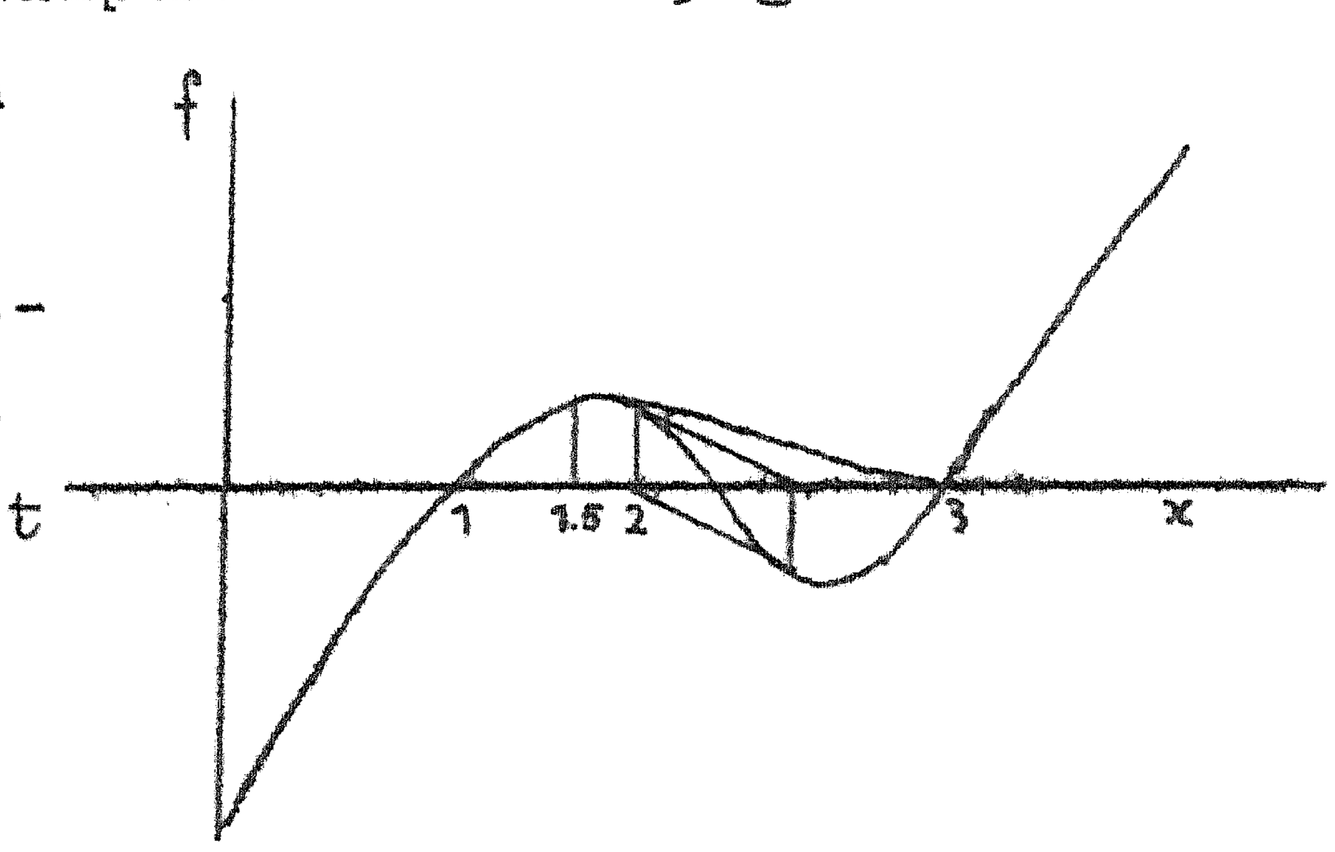


$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}\ .$$

Allereerst behandelen wij enkele voorbeelden.
Wij trachten daartoe wederom het nulpunt 2 te vinden van $f(x) = x^3 - 6x^2 + 11x - 6 = (x - 1)(x - 2)(x - 3)$.
Als beginschatting nemen wij $x = 1.5$.

n	x_n	f_n	f_n'
0	1.5	0.375	-0.25
1	3.0	0	

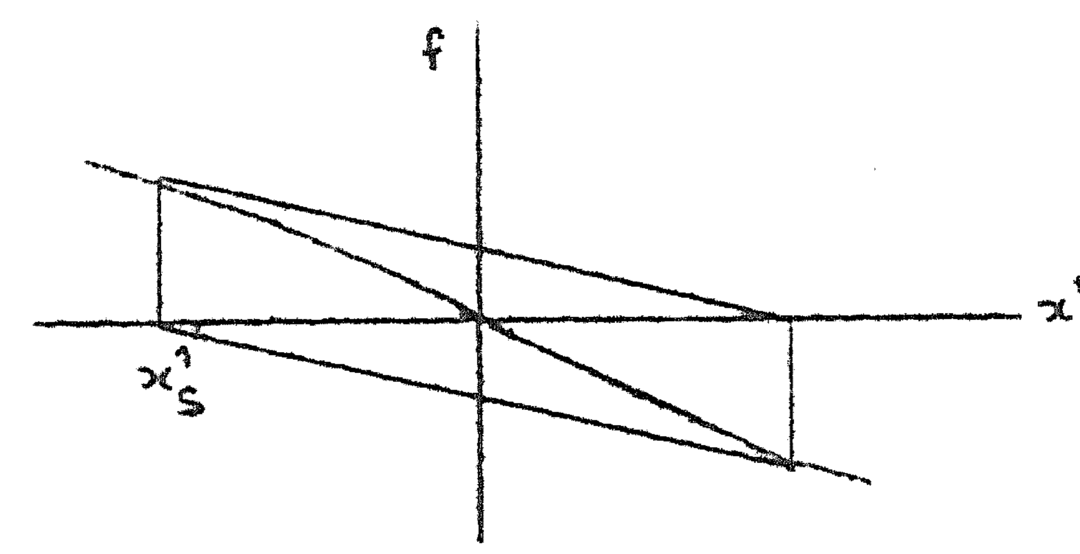
Men ziet dat $x_0 = 1.5$ niet het nulpunt 2 maar 3 geeft.
Vergroten wij x_0 dan zal er een punt komen, waarop de iteratie convergeert naar $x = 2$. Daartussen is een x_0 aan te wijzen zodanig dat $x_2 = x_0$ is, d.w.z. het proces convergeert niet, maar oscilleert zoals in de figuur aangegeven.



Voor deze vergelijking zullen we dit uitrekenen. Stel om de vergelijking te vereenvoudigen $x = x' + 2$:

$f(x) = x'(x'^2 - 1) = g(x')$

$g'(x') = 3x'^2 - 1$



Daar $g(x')$ een oneven functie van x' is behoeven wij slechts x_s te bepalen, zodanig dat als $x_0' = x_s'$, $x_1' = - x_s'$ is. Dan is vanzelf $x_2' = x_s'$.

De vergelijking van de raaklijn door $(x_s', f(x_s'))$ is:

$$\frac{y - f(x_s')}{x' - x'_s} = 3x_s'^2 - 1$$

Het snijpunt met de as is: $x' = x_s' - \dfrac{x_s'(x_s'^2 - 1)}{3x_s'^2 - 1}$ en dit

zou gelijk aan $- x_s'$ moeten zijn.

Hieruit volgt voor x_s':

$5x_s'^3 = x_s'$ $\qquad x_s' = \pm \sqrt{\frac{1}{5}} = \pm\ 0.447$

In het x-vlak zijn de kritieke punten dus $x = 1.553$ en $x = 2.447$

Voor $1.553 < x_0 < 2.447$ convergeert de iteratie naar $x = 2$.

v.b.

n	x_n	f_n	f_n'
0	1.6	.336	-.520
1	2.246	-.231	-.818
2	1.964	.036	-.996
3	2.000	.000	

<u>Vierkantswortel</u> Gevraagd $x = \sqrt{a}$

Beschouw $f(x) = x^2 - a$: $f(\sqrt{a}) = 0$.

Formule van Newton:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^2 - a}{2x_n} = \tfrac{1}{2}(x_n + \frac{a}{x_n}).$$

<u>Gevraagd $x = a^{h/k}$</u> , h,k geheel.

$$x_{n+1} = \frac{k - 1}{k} x_n + \frac{1}{k} a^h.$$

<u>Delen zonder te delen</u> Gevraagd $x = \frac{1}{a}$

Beschouw $f(x) = a - \frac{1}{x}$; $f'(x) = \frac{1}{x^2}$

en $$x_{n+1} = x_n - \frac{a - \frac{1}{x_n}}{\frac{1}{x_n^2}} = 2x_n - ax_n^2 = x_n(2 - ax_n).$$

Deze formule volgt ook uit de voorgaande door $k = -1$, $h = 1$ te stellen.

v.b. $a = 0.25$

n	x_n
0	1
1	1.75
2	2.73
3	3.60
4	3.960
5	4.000

Tenslotte willen wij de convergentiesnelheid van de Newton-iteratie bepalen. Wij beschouwen weer de fout.

$$x_{n+1} - \alpha = x_n - \alpha - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

en ontwikkelen $f(x_n)$ en $f'(x_n)$ in een Taylorreeks om α, $f(\alpha) = 0$ stellend:

$$f(x_n) = (x_n - \alpha)f'(\alpha) + \tfrac{1}{2}(x_n - \alpha)^2 f''(\alpha) + \ldots.$$

$$f'(x_n) = f'(\alpha) + (x_n - \alpha)f''(\alpha) + \ldots.$$

en

$$\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = (x_n - \alpha)f'(\alpha)\left\{1+\tfrac{1}{2}(x_n-\alpha)\frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} + \ldots.\right\}.$$

$$.\ \frac{1}{f'(\alpha)}\left\{1 - (x_n - \alpha)\frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} + \ldots.\right\}$$

$$= (x_n - \alpha)\left\{1 - \tfrac{1}{2}(x_n - \alpha)\frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} + \ldots.\right\}.$$

Dus $x_{n+1} - \alpha = \frac{1}{2}(x_n - \alpha)^2 \frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} + \ldots.$

Stellen wij evenals in (5.2) $\alpha_{n+1} - \alpha = c(x_n - \alpha)^p$ dan is hier dus $p = 2$ i.p v. $p = 1.6$ bij de regula falsi. De Newton iteratie convergeert dus sneller dan de regula falsi. Men moet echter bij Newton de afgeleide bepalen. Is dit veel werk dan kan men beter de regula falsi gebruiken.

Bij toepassing van de formule van Newton wordt dus de fout ongeveer gekwadrateerd, of wat hetzelfde is: het aantal goede cijfers wordt ongeveer verdubbeld.

v.b. $x = \sqrt{2}$

n	x_n
0	$\underline{1.4}$
1	$\underline{1.414}2857$
2	$\underline{1.4142136}$

waarbij onderstreept zijn de goede cijfers.

5.4 Methode van Bernouilli

Met de methode van Bernouilli kan men het grootste (in absolute waarde) nulpunt van een polynoom bepalen.

Laat het polynoom zijn $P_n(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n$

(5.4.1)

Stel dat wij een schatting kennen voor $x, x^2, x^3, \dots, x^{n-1}$, waarbij niet hoeft te gelden b.v. $x^2x^3 = x^5$; dus een willekeurig n-1-tal getallen. Dan zouden wij een schatting van x^n kunnen vinden uit:

$$a_0x^n = -a_1x^{n-1} - a_2x^{n-2} \dots - a_{n-1}x - a_n.$$

Nu zijn dus bekend schattingen voor $x^n, x^{n-1}, \dots, x$ en hiermede zouden wij een schatting voor x^{n+1} kunnen bepalen uit

$$a_0x^{n+1} = -a_1x^n - a_2x^{n-1} - \dots - a_{n-1}x^2 - a_nx$$

Vervolgens kunnen wij een schatting voor x^{n+2}, x^{n+3} enz. vinden.

Stellen wij $x^m = w_m$ dan voldoen w_m aan:

$$a_0w_m = -a_1w_{m-1} - a_2w_{m-2} - \dots - a_{n-1}w_{m-n+1} - a_nw_{m-n} \quad m \geqslant n \tag{5.4.2}$$

Deze recurrente betrekking stelt ons in staat w_k te bepalen en de vraag is nu of deze rij w_k iets te maken heeft met een nulpunt van $P_n(x)$.

Het is duidelijk dat, als $w_k = \alpha^k$, $P_n(\alpha) = 0$ is.

Nu kan bewezen worden dat, zo de nulpunten van $P_n(x)$ verschillend zijn de algemene oplossing van de recurrente betrekking is.

$$w_k = p_1\alpha_1^k + p_2\alpha_2^k + \dots + p_{n-1}\alpha_{n-1}^k + p_n\alpha_n^k \tag{5.4.3}$$

waarin α_i de nulpunten van $P_n(x)$ en p_i constanten zijn.

Laat nu zijn $|\alpha_1| > |\alpha_i|$. Dan is:

$$w_k = p_1\alpha_1^k\left(1 + \frac{p_2}{p_1}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1}\right)^k + \dots\right)$$

Nu is $\left|\frac{\alpha_i}{\alpha_1}\right| < 1$, dus voor grote waarde van k is $w_k \approx p_1\alpha_1^k$

Evenzo geldt $w_{k+1} \approx p_1\alpha_1^{k+1}$ en dus $\alpha_1 \approx \frac{w_{k+1}}{w_k}$ (5.4.4)

M.a.w. de reeks $\frac{w_{k+1}}{w_k}$ convergeert naar het grootste nulpunt α_1.

De convergentiesnelheid vindt men gemakkelijk uit de fouten:

$$\frac{w_{k+1}}{w_k} - \alpha_1 = \frac{p_1\alpha_1^{k+1}\left(1 + \frac{p_2}{p_1}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1}\right)^{k+1} + \dots\right)}{p_1\alpha_1^k\left(1 + \frac{p_2}{p_1}\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1}\right)^k + \dots\right)} - \alpha_1 = -\frac{p_2}{p_1}\alpha_1\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1}\right)^k.$$

De fout wordt dus iedere stap vermenigvuldigd met $\frac{\alpha_2}{\alpha_1}$

Voorbeeld $x^3 - 6x^2 + 11x - 6 = 0$

De recursiebetrekking wordt: $w_n = 6w_{n-1} - 11w_{n-2} + 6w_{n-3}$

Om deze te starten hebben wij nodig schattingen voor w_0, w_1, w_2.

Neem daarvoor resp. 0, 0, 1.

Dan vinden wij:

m	w_m	$\frac{w_{m+1}}{w_m}$	m	w_m	$\frac{w_{m+1}}{w_m}$
0	0		8	3025	3.08
1	0		9	9330	3.06
2	1	6	10	28501	3.04
3	6	4.25	11	86526	3.024
4	25	3.60	12	261265	3.016
5	90	3.33	13	788970	3.010
6	301	3.21	14	2375101	3.007
7	966	3.13	15	7141686	

Men ziet dat de fout steeds met $\frac{2}{3}$ vermenigvuldigd wordt.

Ook kan men het grootste nulpunt vinden, n.l. door $\frac{1}{x} = y$ te stellen. Voor dit voorbeeld wordt de recursiebetrekking:

$$w_n = \frac{1}{6}(11w_{n-1} - 6w_{n-2} + w_{n-3}).$$

en men vindt:

m	w_m	$\frac{w_{m+1}}{w_m}$	m	w_m	$\frac{w_{m+1}}{w_m}$
0	0		5	2.660	1.061
1	0		6	2.822	1.030
2	1	1.833	7	2.907	1.015
3	1.833	1.288	8	2.951	1.008
4	2.360	1.127	9	2.974	

Factor $\frac{1}{2}$ klopt.

Deze methode gaat niet op als nulpunten in absolute waarde gelijk zijn. (5.4.3) geeft dan niet meer de algemene oplossing van (5.4.2).

De methode van Bernouilli geeft dus het grootste (kleinste) nulpunt van een polynoom. De convergentiesnelheid is afhankelijk van de verhouding van de grootste twee nulpunten: zijn deze bijna gelijk dan is de convergentie slecht. Men kan dan beter een andere methode, die van Graeffe (§ 5,5) gebruiken. De methode van Bernouilli convergeert altijd en fouten die men maakt dempen uit: maakt men een fout dan moet men voor straf meer rekenen.

5.5 Procedé van Graeffe (Root squaring).

Gevraagd de nulpunten van $P_n(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n$.
Stel de nulpunten van $P_n(x)$ zijn alle sterk in grootte verschillend:

$$|x_1| \gg |x_2| \gg |x_3| \cdots\cdots \gg |x_n| \qquad (5.5.1)$$

Dit sluit dus o.a. uit complexe nulpunten.
Nu geldt dat:

$$\frac{a_1}{a_0} = -(x_1 + x_2 + \dots + x_n) \approx -x_1$$

$$\frac{a_2}{a_0} = x_1x_2 + x_1x_3 + \dots \approx x_1x_2$$

$$\frac{a_3}{a_0} = -x_1x_2x_3 + \dots \approx -x_1x_2x_3$$

....

....

dus $\frac{a_1}{a_0} \approx -x_1$; $\frac{a_2}{a_1} \approx -x_2$; $\frac{a_3}{a_2} \approx -x_3$ enz. (5.5.2)

Zijn de nulpunten dus zeer sterk in grootte verschillend dan kan men dus op zeer eenvoudige wijze deze bepalen.

Het procedé van Graeffe nu bestaat in het transformeren van een vergelijking met ongelijke wortels in een met zeer sterk verschillende en wel door op te stellen de vergelijking die tot wortels heeft de kwadraten van de wortels van de oorspronkelijke vergelijking. Deze bewerking wordt herhaald totdat goede scheiding der wortels is verkregen.
Opdat $P_n(x) = 0$ zij, moet gelden:

$$a_0x^n + a_2x^{n-2} + a_4x^{n-4} + \dots = -a_1x^{n-1} - a_3x^{n-3} - a_5x^{n-5} - \dots \qquad (5.5.3)$$

kwadratering geeft:

$$a_0^2x^{2n} + 2a_0a_2^2x^{2n-2} + (2a_0a_4 + a_2^2)x^{2n-4} + (2a_0a_6 + 2a_2a_4)x^{2n-6} + \dots =$$

$$a_1^2x^{2n-2} + 2a_1a_3x^{2n-4} + (2a_1a_5 + a_3^2)x^{2n-6} + \dots$$

of $a_0^2x^{2n} + (2a_0a_2 - a_1^2)x^{2n-2} + (2a_0a_4 - 2a_1a_3 + a_2^2)x^{2n-4} +$
$+(2a_0a_6 - 2a_1a_5 + 2a_2a_4 - a_3^2)x^{2n-6} + \dots = 0$ (5.5.4)

De opbouw van de coëfficiënten is duidelijk.
(5.5.4) heeft wortels $\pm x_i$. Stelt men $x^2 = y$ dan gaat (5.5.4) over in

$$a_0^2y^n + (2a_0a_2 - a_1^2)y^{n-1} + (2a_0a_4 - 2a_1a_3 + a_2^2)y^{n-2} + \dots = 0 \qquad (5.5.5)$$

met als wortels x_i^2.

(5.5.5) is dus de vergelijking waarvan de wortels kwadraten zijn van die van de gegeven vergelijking.
Men gaat verder en construeert de coëfficiënten van de vergelijking die tot wortels heeft x_i^4 enz. Als de x_i verschillend waren zullen de $x_i^{2^m}$, na m stappen, sterk verschillen. Als wij de coëfficiënten van de vergelijking waaraan $x_i^{2^m}$ voldoen aanduiden met $a_j^{(m)}$, dus $a_j^{(0)} = a_j$, dan vinden wij

$$\frac{a_1^{(m)}}{a_0^{(m)}} \approx x_1^{2^m}, \quad \frac{a_2^{(m)}}{a_1^{(m)}} \approx x_2^{2^m}, \text{ enz.}$$

Door m-maal wortel te trekken vindt men x_1, x_2, enz., op het teken na, dit kan door substitutie in de gegeven vergelijking gevonden worden.

Aan de coëfficiënten $a_j^{(m)}$ kan men zien of m hoog genoeg is opgevoerd: is m groot genoeg dan geldt zoals eenvoudig is in te zien:

$$|a_j^{(m+1)}| = (a_j^{m})^2.$$

De coëfficiënten gaan op den duur kwadrateren.

__Voorbeeld__ $x^3 - 6x^2 + 11x - 6 = 0$

m	$a_0^{(m)}$	$a_1^{(m)}$	$a_2^{(m)}$	$a_3^{(m)}$
0	1	- 6	11	- 6
1	1	- 14	49	- 36
2	1	- 98	1393	- 1296
3	1	- 6818	16 86433	- 16 79616
4	1	- 431 12258	282 11530 19713	- 282 12778 69056

m	$x_1^{(m)}$	$x_2^{(m)}$	$x_3^{(m)}$
0	6.000	1.833	.545
1	3.742	1.871	.857
2	3.146	1.942	.982
3	3.014	1.991	.999
4	3.000	2.000	1.000

Het voorkomen van meervoudige of complexe wortels geeft complicaties. Dan zijn de benaderingen (5.5.2) niet meer geldig.
We beschouwen allereerst een reele dubbel-wortel. Stel $x_1 = x_2$.
Dan geldt

$$\frac{a_1}{a_0} \approx -2x_1 \quad \text{en} \quad \frac{a_2}{a_0} \approx x_1^2$$

Er geldt dus niet meer dat alle coëfficiënten gaan kwadrateren; wel geldt dat

$\left| a_1^{(m+1)} \right| = \frac{1}{2}(a_1^{(m)})^2$. De coëfficiënten $a_j^{(m)}$, $j > 1$ kwadrateren wel.

Ziet men een dergelijk verschijnsel, dan weet men dus dat men met een dubbel-wortel te maken heeft. Geldt $x_i = x_{i+1}$ dan geldt dat alle coëfficiënten kwadrateren behalve a_i, die "half kwadrateert":

$\left| a_i^{m+1} \right| = \frac{1}{2}(a_i^{(m)})^2$.

Men vindt x_i uit een van de twee vergelijkingen:

$$\frac{a_i^{(m)}}{a_{i-1}^{(m)}} \approx + 2x_i^{2^m} \quad , \quad \frac{a_{i+1}^{(m)}}{a_i^{(m)}} = + \frac{x_i^{2^m}}{2}$$

Voorbeeld $(x - 2)(x - 1)^2 = x^3 - 4x^2 + 5x - 2 = 0$

m	$a_0^{(m)}$	$a_1^{(m)}$	$a_2^{(m)}$	$a_3^{(m)}$
0	1	- 4	5	- 2
1	1	- 6	9	- 4
2	1	- 18	33	- 16
3	1	- 258	513	- 256
4	1	- 65538	131073	- 65536

Men ziet dat $a_0^{(m)}$, $a_1^{(m)}$, $a_3^{(m)}$ kwadrateren; $a_2^{(m)}$ kwadrateert half: dat wijst op $x_2 = x_3$.

$$\text{Wij vinden } x_1 = \sqrt[16]{65538} = 2.0000$$

$$x_{2,3} = \sqrt[16]{\frac{131073}{2.65538}} = 1.0000$$

$$\text{of ook } \quad x_{2,3} = \sqrt[16]{\frac{2.65536}{131073}} = 1.0000$$

Heeft men een k-voudige wortel $(k > 2)$ dan treedt een dergelijk verschijnsel op.

Complexe wortels geven grote moeilijkheden, zoals aan een voorbeeld duidelijk gemaakt zal worden. Stel wij hebben een paar complexe wortels:

$x_i = re^{i\varphi}$ en $x_{i+1} = re^{-i\varphi}$

Wij vinden dan:

$$\frac{a_{i-1}}{a_0} = \pm (x_1 x_2 \ldots . x_{i-1} + \ldots .)$$

$$\frac{a_i}{a_0} = \pm (x_1 x_2 \ldots x_{i-1} x_i + x_1 x_2 \ldots x_{i-1} x_{i+1} + \ldots) =$$

$$\pm(x_1 x_2 \ldots x_{i-1} . 2r\cos \quad + \ldots)$$

$$\frac{a_{i+1}}{a_0} = \pm (x_1 x_2 \ldots x_i x_{i+1} + \ldots) = \pm (x_1 x_2 \ldots x_{i-1} r^2 + \ldots)$$

Hieruit volgt dat alle coëfficiënten kwadrateren behalve a_i die oscilleert. Voert men nu m stappen van het Graeffe-proces uit dan kan men op de normale wijze bepalen x_1 t/m x_{i-1}. Voor x_i en x_{i+1} vindt men de twee vergelijkingen:

$$\frac{a_{i+1}^{(m)}}{a_{i-1}^{(m)}} = (r^{2^m})^2$$

$$\frac{a_i^{(m)}}{a_{i-1}^{(m)}} = - 2r^{2^m} \cos 2^m \varphi$$

Men kan dus direct r bepalen; de bepaling van φ stuit op moeilijkheden wegens de meerwaardigheid van de bgcos.

In dit geval waarin we slechts een paar complexe wortels hebben aangenomen, kunnen we gemakkelijk deze moeilijkheid omzeilen. Immers geldt $-\frac{a_1}{a_0} = x_1 + x_2 + \ldots x_n = \sum_{\substack{k \neq i \\ k \neq i+1}} x_k + 2u$ als u het reele deel is van x_i.

Kennen we alle reele wortels dan kunnen wij dus u bepalen en uit $u^2 + v^2 = r^2$ vinden wij het imaginaire deel $\pm$ v.

<u>Voorbeeld</u> $x^3 - x - 1 = 0$

m	$a_0^{(m)}$	$a_1^{(m)}$	$a_2^{(m)}$	$a_3^{(m)}$
0	1	0	- 1	-1
1	1	- 2	1	-1
2	1	- 2	- 3	-1
3	1	- 10	5	-1
4	1	- 90	5	-1
5	1	- 8090	- 165	-1
6	1	- 654 48430	11045	

$a_2^{(m)}$ oscilleert: complexe wortels.

Men vindt $x_1 = (65448430)^{1/64} = 1.3247$

$$r^2 = \left(\frac{1}{65448430}\right)^{1/64} = 0.7549$$

$$n = - 0.6624$$

$$v = \pm 0.5622$$

Dus $x_1 = 1.3247$; $x_{2,3} = - 0,6624 \pm 0.5622i$

Zou men geen gebruik maken van u en v dan zou men φ moeten bepalen uit $\cos 64\varphi = 0.68263$

hetgeen 64 oplossingen geeft.

Wij hebben gezien dat het voorkomen van complexe wortels moeilijkheden geeft voor de bepaling van het argument, niet voor de bepaling van de modulus. Om de bepaling van het argument te omzeilen kan men het volgende doen: Stel $x = y + h$, waarbij (dat is de moeilijkheid) een reële h zo dient gekozen te worden dat als $|x_i|>|x_j|$, ook geldt $|y_i|>|y_j|$, d.w.z. dat de volgorde van de nulpunten niet verstoord wordt.

Stel nu dat wij de modulus van x_i en x_{i+1}, r_i bepaald hebben en ook de modulus r_i' van y_i en y_{i+1}. Als u_i, v_i, u_i', v_i' resp. reële en imaginaire delen van x_i en y_i zijn geldt:

$$r_i^2 = u_i^2 + v_i^2$$

$$r_i'^2 = u_i'^2 + v_i'^2 = (u_i - h)^2 + v_i'^2$$

Aftrekken geeft: $2u_i h - h^2 = r_i^2 - r_i'^2$ waaruit men met bekende h en tevoren bepaalde r_i en r_i', u_i kan vinden. Dan volgt v_i uit

$$v_i = \pm\sqrt{r_i^2 - u_i^2}.$$

Bij toepassing van deze methode moet men dus tweemaal het Graeffe-proces toepassen. Het kiezen van h is een lastig probleem, waarvoor geen methode is aan te geven. Door Lehmer is een algorithme ontwikkeld die met infinite-simale h werkt.

Voorbeeld: $x^3 - x - 1 = 0$

Wij hebben eerder gevonden $r_2^2 = .7549$

Stel $x = y - 1$ dan gaat de vergelijking over in $y^3 - 3y^2 + 2y - 1=0$

Toepassing van Graeffe geeft

0	1	- 3	2	-1
1	1	- 5	- 2	-1
2	1	- 29	- 6	-1
3	1	- 853	- 22	-1
4	1	- 7 27653	- 1222	-1
5	1	- 52 94788 90853	37978	-1

en $r_2'^2 = \left(\dfrac{1}{52\ 94788\ 90853}\right)^{1/32} = .4302.$

$$u_{2,3} = \frac{1 + 0.7549 - 0.4302}{-2} = - 0.6624$$

$$v_{2,3} = \pm 0.5622$$

Dit klopt met vroegere resultaten.

5.6 Methode van Bairstow.

Polynomen met reële coëfficiënten kunnen altijd geschreven worden als product van lineaire en reële kwadratische factoren. Immers als wij hebben een wortelpaar $u \pm iv$ dan komt voor de factor $(x - u - iv)(x - u + iv) = x^2 - 2ux + u^2 + v^2 = x^2 + p_0x + q_0$. De methode van Bairstow stelt ons in staat p_0 en q_0 te bepalen en wel als volgt.

$$P_n(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n =$$

$$= (x^2 + px + q)(b_0x^{n-2} + b_1x^{n-3} + \dots + b_{n-3}x + b_{n-2} + Rx+S \qquad (5.6.1)$$

waarbij p en q schattingen zijn voor p_0 en q_0. Als $p = p_0$ en $q = q_0$ dan geldt $R = 0$, $S = 0$. Wij willen nu een iteratie maken die uit gekozen schattingen een nieuw paar oplevert dat een betere schatting is, enz.

Uit (5.6.1) volgen de vergelijkingen:

$$\begin{aligned}
a_0 &= b_0\\
a_1 &= b_1 + pb_0\\
a_2 &= b_2 + pb_1 + qb_0\\
&\dots\dots\dots \qquad (5.6.2)\\
&\dots\dots\dots\\
a_{n-1} &= b_{n-1} + pb_{n-2} + qb_{n-3} = pb_{n-2} + qb_{n-3} + R\\
a_n &= b_n + pb_{n-1} + qb_{n-2} = qb_{n-2} + S
\end{aligned}$$

Dus
$$\begin{aligned} R &= b_{n-1} \\ S &= b_n + pb_{n-1} \end{aligned} \qquad (5.6.3)$$

Vóor een reële kwadratische factor van $P_n(x)$ geldt $R = 0$, $S = 0$. b_i is een functie van p en q. Uit (5.6.3) zullen wij nu met behulp van de regel van Newton oplossen het stelsel:

$$\begin{aligned} b_{n-1} &= 0 \\ b_n + pb_{n-1} &= 0 \end{aligned} \qquad (5.6.4)$$

Daartoe zullen wij moeten nagaan hoe de regel van Newton wordt voor het geval van twee vergelijkingen met twee onbekenden.

$$R(p_0,q_0) = R(p,q) + \frac{\partial R(p,q)}{\partial p}(p_0 - p) + \frac{\partial R(p,q)}{\partial q}(q_0 - q) + \dots$$

$$S(p_0,q_0) = S(p,q) + \frac{\partial S(p,q)}{\partial p}(p_0 - p) + \frac{\partial S(p,q)}{\partial q}(q_0 - q) + \dots \qquad (5.6.5)$$

Nu is $R(p_0,q_0) = S(p_0,q_0) = 0$. Als wij nog stellen $\Delta p = p_0 - p$

en $\Delta q = q_0 - q$, dan vinden wij voor Δp en Δq de lineaire vergelijkingen

$$\frac{\partial R}{\partial p}\Delta p + \frac{\partial R}{\partial q}\Delta q + R = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial p}\Delta p + \frac{\partial S}{\partial q}\Delta q + S = 0 \qquad (5.6.6)$$

waarbij de argumenten van R, S en hun afgeleiden zijn p en q. Om (5.6.6) te kunnen oplossen moeten wij de partiele afgeleiden van R en S bepalen. Uit (5.6.3) volgt:

$$\frac{\partial R}{\partial p} = \frac{\partial b_{n-1}}{\partial p}, \quad \frac{\partial R}{\partial q} = \frac{\partial b_{n-1}}{\partial q}$$

$$\frac{\partial S}{\partial p} = \frac{\partial b_n}{\partial p} + p\frac{\partial b_{n-1}}{\partial p} + b_{n-1}, \qquad \frac{\partial S}{\partial q} = \frac{\partial b_n}{\partial q} + p\frac{\partial b_{n-1}}{\partial q}. \qquad (5.6.7)$$

Hiermede gaat (5.6.6) over in:

$$\frac{\partial b_{n-1}}{\partial p}\Delta p + \frac{\partial b_{n-1}}{\partial q}\Delta q + b_{n-1} = 0 \qquad (5.6.8)$$

$$\left(\frac{\partial b_n}{\partial p} + p\frac{\partial b_{n-1}}{\partial p} + b_{n-1}\right)\Delta_p + \left(\frac{\partial b_n}{\partial q} + p\frac{\partial b_{n-1}}{\partial q}\right)\Delta_q + b_n + pb_{n-1} = 0$$

of door de eerste vergelijking p maal van de tweede af te trekken:

$$\frac{\partial b_{n-1}}{\partial p}\Delta_p + \frac{\partial b_{n-1}}{\partial q}\Delta_q + b_{n-1} = 0 \qquad (5.6.9)$$

$$\left(\frac{\partial b_n}{\partial p} + b_{n-1}\right)\Delta_p + \frac{\partial b_n}{\partial q}\Delta_q + b_n = 0$$

Uit (5.6.2) vinden wij:

$$\frac{\partial b_k}{\partial p} = -b_{k-1} - p\frac{\partial b_{k-1}}{\partial p} - q\frac{\partial b_{k-2}}{\partial p} \qquad (5.6.10)$$

met $\frac{\partial b_0}{\partial p} = 0$ en $\frac{\partial b_1}{\partial p} = b_0$

(5.6.10) geeft een recursiebetrekking voor $\frac{\partial b_k}{\partial p}$. Als wij nog stellen

$$-\frac{\partial b_k}{\partial p} = c_{k-1} \qquad (5.6.11)$$

dan gaat (5.6.10) over in

$$c_k = b_k + pc_{k-1} + qc_{k-2} \qquad (5.6.12)$$

met $c_{-1} = 0$ en $c_0 = b_0$

Wij vinden dus voor c_k een dergelijk recursiestelsel als voor b_k.

Nu moeten wij nog de afgeleiden $\frac{\partial b_k}{\partial q}$ hebben:

$$\frac{\partial b_k}{\partial q} = - b_{k-2} - p \frac{\partial b_{k-1}}{\partial q} - q \frac{\partial b_{k-2}}{\partial q} \tag{5.6.13}$$

met $\frac{\partial b_0}{\partial q} = \frac{\partial b_1}{\partial q} = 0$ en $\frac{\partial b_2}{\partial q} = b_0$

Als wij stellen $-\frac{\partial b_k}{\partial q} = d_{k-2}$ dan vinden wij

$$d_k = b_k + pd_{k-1} + qd_{k-2} \text{ met} \tag{5.6.14}$$

$d_{-1} = 0$ en $d_0 = b_0$

d.w.z. $d_k = c_k$ en $\frac{\partial b_k}{\partial p} = \frac{\partial b_{k+1}}{\partial q}$.

Voor de afgeleiden in (5.6.9) vinden wij:

$$\frac{\partial b_{n-1}}{\partial p} = - c_{n-2}; \quad \frac{\partial b_{n-1}}{\partial q} = - c_{n-3};$$

$$\frac{\partial b_n}{\partial p} = - c_{n-1}; \quad \frac{\partial b_n}{\partial q} = - c_{n-2}$$

Als wij nu een nieuwe c^x_{n-1} definieren als

$$c^x_{n-1} = - \frac{\partial b_n}{\partial p} - b_{n-1} = c_{n-1} - b_{n-1}$$

of $c^x_{n-1} = pc_{n-2} + qc_{n-3}$

(dus volgens dezelfde formule als eerst met dien verstande dat hierin $b_{n-1} = 0$ gesteld wordt) dan gaat (5.6.9) over in

$$c_{n-2}\Delta p + c_{n-3}\Delta q = b_{n-1}$$

$$c^x_{n-1}\Delta p + c_{n-2}\Delta q = b_n \tag{5.6.15}$$

waaruit dus volgt als

$$D = c^2_{n-2} - c^x_{n-1}c_{n-3}$$

$$\Delta p = \frac{1}{D}(b_{n-1}c_{n-2} - b_n c_{n-3}) \tag{5.6.16}$$

en $\Delta q = \frac{-1}{D}(b_{n-1}c^x_{n-1} - b_n c_{n-2})$

Met Δp en Δq vinden wij een nieuwe schatting

$$p' = p + \Delta p$$

$$q' = q + \Delta q$$

waarmee men de bewerking herhaalt. Dit proces is kwadratisch convergent hetgeen men direct uit (5.6.5) afleidt.

Moeilijkheden treden op als $D = 0$ of zeer klein is. Dit wijst op het voorkomen van twee (bijna) gelijke kwadratische factoren.

Over de convergentie kunnen wij hier niet veel zeggen; naar welke nulpunten de iteratie convergeert hangt af van de beginschatting p en q.

Tenzij men iets beters weet kan men met $p = q = 0$ beginnen.

Heeft men eenmaal een wortelpaar gevonden, dan geven de b_k de coëfficiënten van het polynoom waaruit de kwadratische factor is uitgedeeld. Om verdere wortels te vinden gaat men van deze b_k uit. Bij een dergelijke werkwijze zal men precisie verliezen: men doet goed om de paren p en q die men vindt met de oorspronkelijke coëfficiënten a_k te itereren totdat ze constant zijn.

<u>Voorbeeld</u> $x^4 - 2x^3 - 4x^2 + 5x - 6 = 0$

$p = 0$	$q = 0$		$p = -2$	$q = 1.5$	$p = -.61$	$q = .59$
1	1	1	1	1	1	1
-2	-2	-2	0	2	-1.3900	- .7800
-4	-4	-4	-5.5	-3	-5.4379	-6.5037
5	5	0	-6	-9	2.5030	-3.5071
-6	-6		-9.75		-1.4561	

$D = 16$	$D = 27$	$D = 39.56$
$\Delta_p = -2$	$\Delta_p = 1.39$	$\Delta_p = -.440$
$\Delta_q = 1.5$	$\Delta_q = -.91$	$\Delta_q = .461$

Hierna vindt men:

b	q
-1.050	1.051
- .993	.992
-1.000	1.000

De resterende b_k^n zijn 1, -1, -6

De twee kwadratische factoren zijn dus

$x^2 - x + 1$ en $x^2 - x - 6$.

De wortels zijn dus

$x_1 = -3$

$x_2 = 2$

$x_{3,4} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} i \sqrt{3}$.

CURSUS WETENSCHAPPELIJK REKENAAR(STER)

Vraagstukken Numerieke Wiskunde

1. Gegeven $x = -2;\ -1;\ 1;\ 2$. Bepaal met betrekking tot deze basispunten de Lagrange-coëfficiënten en leid af de uitdrukkingen voor

$$f(0),\ f'(0) \text{ en } \int_{-2}^{2} f(x)dx$$

uitgedrukt in de functiewaarden op bovenstaande basispunten.

------

2. Bepaal met trapeziumregel, regel van Simpson ~~en 3/8-regel~~ $\int_0^1 f(x)dx$ met

x	f(x)
0	.79788
.125	.79168
.250	.77334
.375	.74371
.500	.70413
.625	.65632
.750	.60227
.875	.54411
1.000	.48394

In 5 decimalen geldt $\int_0^1 (x)dx = .68269$

Bepaal tevens met behulp van differenties $\int_0^1 f(x)dx$ en tevens

$$\int_{0.250}^{x} f(x)dx \text{ voor } x = 0.250(0.125)0.750$$

------

3. Bepaal voor f(x) uit no. 2:

$$f'(x) \text{ voor } x = 0.250(0.125)0.750$$
$$f''(x) \text{ voor } x = 0.250(0.125)0.750$$

en x zodat $f(x) = 0.60000(0.05000)0.75000$.

------

4. Bepaal f(0.20000) uit:

x	f(x)
.17520	.84147
.25386	.86742
.33565	.89121
.42078	.91276
.50946	.93204

5. Bepaal ~~met iteratie~~ x zodat $f(x) = .99800$ uit:

x	f(x)
1.4	.98545
1.5	.99749
1.6	.99957
1.7	.99166
1.8	.97385

------

6. Bepaal de kleinste positieve wortel van $\operatorname{tg} x = cx$ in 5 decimalen voor $c = 1.01;\ 2;\ 30$.

------

7. Bepaal in 5 decimalen de reele wortels van:

$$x^3 - 2x - 5 = 0$$

$$x^2 - 3x - 4\sin^2 x = 0$$

------

8. Bepaal in 5 decimalen grootste nulpunt van

$$x^3 - 9x^2 + 18x - 6$$

------

9. Bepaal in 5 decimalen grootste en kleinste nulpunt van

$$x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$$

------

10. Bepaal met Graeffe in 5 decimalen de nulpunten van

$$x^6 - x^5 - 21x^4 - x^3 + 24x^2 + 38x - 40$$

------

11. Bepaal met Bairstow in 5 decimalen de nulpunten van

$$x^6 + 3x^5 + 6x^4 - 16x^3 + 35x^2 - 53x + 30$$

------

12. Bepaal benaderingen voor

$\int_{-4}^{4} \frac{dx}{1 + x^2}$ met 2, 3, 4 en 5-punts Gauss-formules en vergelijk

deze met de werkelijke waarde.

------

13. Bepaal x_k en w_k zodat

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{1}^{3} w_k f(x_k)$$

exact is voor een polynoom $f(x)$ van zo hoog mogelijke graad en wel met:

0. x_i en w_i vrij
1. $x_1 = -\frac{1}{2}$; $x_2 = 0$; $x_3 = \frac{1}{2}$
2. $w_1 = w_2 = w_3$
3. $x_1 = -1$

en geef op in ieder der gevallen de graad van het polynoom waarvoor de formule nog exact is.

------

14. Leid af met verwaarlozing van gewone en gemengde differentie van orde vier en hoger een interpolatie formule voor een functie van twee veranderlijken:

$$\begin{aligned} f(x+ph;y+qk) = &\left[(1-p)(1-q) + (1-q)E_2(p)\delta_x^2 + (1-p)E_2(q)\delta_y^2\right] f(x,y) \\ &+ \left[p(1-q) + (1-q)F_2(p)\delta_x^2 + pE_2(q)\delta_y^2\right] f(x+h,y) \\ &+ \left[q(1-p) + q\,E_2(p)\delta_x^2 + (1-p)F_2(q)\delta_y^2\right] f(x,y+k) \\ &+ \left[pq + q\,F_2(p)\delta_x^2 + pF_2(q)\delta_y^2\right] f(x+h,y+k) \end{aligned}$$

------

15. Bepaal met de formule uit no. 14

$f(6.55;\ 1.05)$ en $f(6.524;\ 1.042)$

met:

	$y = 1.0$			$y = 1.1$		
x	$f(x,y)$	δ_x^2	δ_y^2	$f(x,y)$	δ_x^2	δ_y^2
6.5	998 9623	-168	-31	998 9783	-171	-28
6.6	999 0866	-147	-28	999 1026	-150	-26
