

TECHNISCHE HOGESCHOOL EINDHOVEN

Afdeling Algemene Wetenschappen

Onderafdeling der Wiskunde

Cursus

Wetenschappelijk Rekenaar A

te Eindhoven

Deel I

J.J.A. Beenakker - P.J. de Doelder - J. Koekoek - C. Ligtmans

Bibelwet

Cursus

**Wetenschappelijk Rekenaar A
te Eindhoven**

Deel I

Typewerk verzorgd door
MEJ. M. H. E. WEIJERS

J. J. A. Beenakker – P. J. de Doelder – J. Koekoek – C. Ligtmans

INHOUD

	pag
Hoofdstuk I : <u>Interpolatie bij ongelijke intervallen</u>	
1. Inleiding	1
2. Formule van Lagrange	1
3. Gedeelde differenties	3
4. Formule van Newton	7
5. Restterm	10
6. Aitken's interpolatiemethode	13
7. Inverse interpolatie	15
Hoofdstuk II : <u>Interpolatie bij gelijke intervallen</u>	
1. Formule van Lagrange	17
2. Differenties	19
3. Eenvoudige toepassingen van differenties	25
4. Interpolatieformules van Newton-Gregory	30
5. Formules van Gauss en Stirling	32
6. Formule van Everett	34
7. Formule van Bessel	35
8. Het gebruik van interpolatieformules	36
9. Terugworp (throwback)	39
10. Inverse interpolatie	41
Hoofdstuk III : <u>Numerieke integratie</u>	
1. Inleiding	44
2. Integratieformules met functiewaarden	44
3. Integratie met behulp van differenties	49
4. Integratie met somfunctie	55
5. Gauss-integratie	61
Hoofdstuk IV : <u>Numerieke differentiatie</u>	65
Hoofdstuk V : <u>Differentiaalvergelijkingen</u>	
1. Inleiding	69
2. Exacte differentiaalvergelijkingen	71
3. Lineaire differentiaalvergelijkingen van de eerste orde	73
4. Homogene differentiaalvergelijkingen van de eerste orde	76
5. Oplossen van differentiaalvergelijkingen met behulp van machtreeksen	77
6. Stelsels differentiaalvergelijkingen	82
Hoofdstuk VI : <u>Numerieke integratie van differentiaalvergelijkingen</u>	
1. De Taylorreeks	85
2. De trapeziumregel	92
3. Milne's methode	96
4. Integratie met behulp van differenties	100
5. Methode van Runge-Kutta	105
6. Hogere afgeleiden en stelsels differentiaalvergelijkingen	113
7. Tweede orde vergelijkingen	116
8. Tweepuntsrandvoorwaarden	121
9. Partiële differentiaalvergelijkingen	123

NUMERIEKE WISKUNDE

HOOFDSTUK I : INTERPOLATIE BIJ ONGELIJKE INTERVALLEN.

1. Inleiding

In de numerieke wiskunde komt het vaak voor, dat men van een getabelleerde functie $y = f(x)$ de functiewaarde moet bepalen voor een argument, dat niet in de tabel staat. Wanneer $f(x)$ niet gemakkelijk direct te berekenen is, maakt men gebruik van interpolatie.

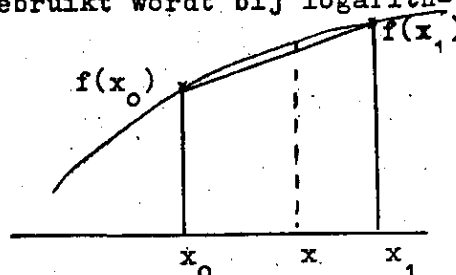
Bekend is de lineaire interpolatie, die o.a. gebruikt wordt bij logaritmische en goniometrische tafels.

Bij interpolatie tussen de basispunten x_0 en x_1 wordt $f(x)$ hierbij vervangen

door een lineaire functie $f^*(x)$ met $f^*(x_0) = f(x_0)$ en $f^*(x_1) = f(x_1)$.

Dan geldt dus

$$f(x) \approx f^*(x) = f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \{f(x_1) - f(x_0)\}.$$



Lineaire interpolatie kan echter alleen worden toegepast als het interval d.w.z. het verschil tussen twee opeenvolgende waarden van het argument in een tabel, klein genoeg is.

In het algemeen zal men trachten $f(x)$ te vervangen door een eenvoudige benaderingsfunctie $f^*(x)$, die in $n + 1$ basispunten $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$

dezelfde waarden heeft als $f(x)$ en voor andere punten een goede benadering geeft.

Wij hebben dus

$$f(x) = f^*(x) + R(x).$$

$R(x)$ heet de restterm en is de fout, die bij de interpolatie wordt gemaakt. Voor $f^*(x)$ kan men verschillende soorten functies kiezen, b.v. polynomen, gebroken rationale functies, sommen van trigonometrische functies enz. Interpolatie d.m.v. polynomen wordt in de praktijk het meest gebruikt. We zullen dan ook alleen dit geval beschouwen.

2. Formule van Lagrange

We willen door de punten x_0, x_1, \dots, x_n een polynoom $f^*(x)$ van zo laag mogelijke graad leggen, zodanig dat $f^*(x_i) = f(x_i)$ voor $i = 0, 1, \dots, n$.

We zullen laten zien, dat het mogelijk is $f^*(x)$ zo te kiezen dat de graad hoogstens n is. Verder merken we op, dat er precies één polynoom van de graad $\leq n$ is. Voldoen namelijk $f^*(x)$ en $g^*(x)$ beiden, dan is $f^*(x) - g^*(x)$ een polynoom van hoogstens de graad n met $n + 1$ nulpunten, dus identiek nul.

We proberen $f^*(x)$ te schrijven in de vorm

$$f^*(x) = L_0(x) f(x_0) + L_1(x) f(x_1) + \dots + L_n(x) f(x_n), \quad (1.2.1)$$

waarbij $L_0(x), \dots, L_n(x)$ polynomen van hoogstens de graad n zijn. Nu zal inderdaad $f^*(x_i) = f(x_i)$ zijn, als geldt dat $L_i(x_i) = 1$ en $L_i(x_j) = 0$ voor $i \neq j$. Dus heeft $L_i(x)$ de nulpunten $x_0, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$. Hieruit volgt

$$L_i(x) = C_i(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)$$

waarbij C_i een constante is. De eis $L_i(x_i) = 1$ geeft

$$C_i = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)}$$

Uiteindelijk vinden we dus

$$\begin{aligned} f(x) &= f^*(x) + R_{n+1}(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n)} f(x_0) + \\ &\frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_n)} f(x_1) + \dots \\ &+ \dots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\dots(x_n-x_{n-1})} f(x_n) + R_{n+1}(x). \end{aligned} \quad (1.2.2)$$

Dit is de interpolatieformule van Lagrange.

$R_{n+1}(x)$ is de restterm bij interpolatie d.m.v. een n^e graadspolynoom door $n+1$ punten. In § 5 zal voor deze restterm een uitdrukking worden afgeleid.

De polynomen $L_i(x)$ heten Lagrangecoëfficiënten.

Opm. 1 : Formule (1.2.2) kan in meer compacte vorm worden geschreven door te stellen

$$\pi_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n).$$

Dan is

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

en gaat (1.2.2) over in

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

Opm. 2 : We kunnen (1.2.2) in het bijzonder toepassen op de functie $f(x) \equiv 1$.

Aangezien $f^*(x)$ eenduidig bepaald is, geldt dan ook $f^*(x) \equiv 1$. Dus

$$L_0(x) + L_1(x) + \dots + L_n(x) = 1 \text{ voor elke } x. \quad (1.2.3)$$

Deze betrekking kunnen we gebruiken als controle op de berekening van Lagrangecoëfficiënten.

Voorb. : Bepaal het polynoom door de punten

x	-1	0	1	2
f(x)	1	1	1	-5

$$\begin{aligned}
 f^*(x) &= \frac{(x-0)(x-1)(x-2)}{(-1-0)(-1-1)(-1-2)} \cdot 1 + \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(0+1)(0-1)(0-2)} \cdot 1 + \\
 &+ \frac{(x+1)(x-0)(x-2)}{(1+1)(1-0)(1-2)} \cdot 1 + \frac{(x+1)(x-0)(x-1)}{(2+1)(2-0)(2-1)} \cdot (-5) = \\
 &= -\frac{1}{6}x(x-1)(x-2) + \frac{1}{2}(x+1)(x-1)(x-2) - \frac{1}{2}(x+1)x(x-2) + \\
 &-\frac{5}{6}(x+1)x(x-1) = -x^3 + x + 1.
 \end{aligned}$$

3. Gedeelde differenties

Is in een tabel $f(x)$ gegeven voor de waarden x_0, x_1, x_2, \dots van het argument, dan kunnen we berekenen :

$$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \quad f[x_1, x_2] = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \quad \text{enz.}$$

Dit zijn de eerste gedeelde differenties.
Merk op dat $f[x_0, x_1] = f[x_1, x_0]$

Vervolgens kunnen we vormen

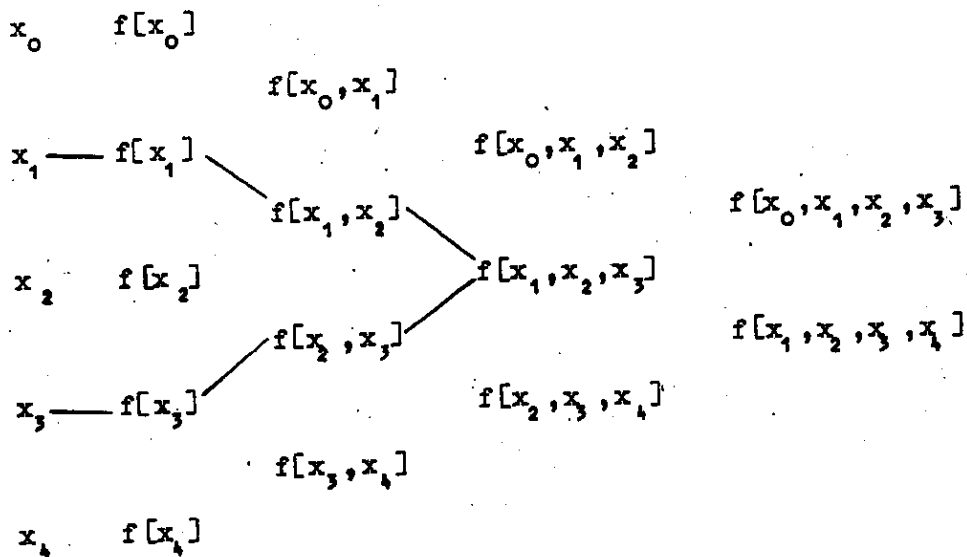
$$\begin{aligned}
 f[x_0, x_1, x_2] &= \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}, \\
 f[x_1, x_2, x_3] &= \frac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1} \quad \text{enz.}
 \end{aligned}$$

Dit zijn de tweede gedeelde differenties.
In het algemeen kunnen we berekenen de grootheden

$$f[x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+n}] = \frac{f[x_{j+1}, x_{j+2}, \dots, x_{j+n}] - f[x_j, x_{j+1}, \dots, x_{j+n-1}]}{x_{j+n} - x_j} \quad (1.3.1)$$

de n^{de} gedeelde differenties.

De gedeelde differenties kunnen overzichtelijk worden gerangschikt in een tabel :



Hierbij is $f[x_1] = f(x_1)$.

Opm. : De argumenten x_0, x_1, x_2, \dots behoeven niet in volgorde van grootte te worden genomen.

Voorb. 1 : Neem $f(x) = x^3$ met $x = 0, 1, 4, 3, 6, 7$.
Het schema wordt :

x	$f(x)$					
0	0					
		1				
1	1		5			
		21		1		
4	64		8		0	
		37		1		0
3	27		13		0	
		63		1		
6	216		16			
		127				
7	343					

De omrande tweede gedeelde differentie $f[4, 3, 6]$ wordt berekend als

$$\frac{63 - 37}{6 - 4} = 13.$$

Men kan de gedeelde differentie ook als volgt schrijven :

$$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0}$$

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{1}{x_2 - x_0} \{ f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1] \} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{f(x_0)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + \frac{f(x_1)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + \frac{f(x_2)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\
f[x_0, x_1, \dots, x_n] &= \frac{f(x_0)}{(x_0-x_1) \dots (x_0-x_n)} + \frac{f(x_1)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2) \dots (x_1-x_n)} + \dots \\
&\quad + \frac{f(x_n)}{(x_n-x_0) \dots (x_n-x_{n-1})} \quad (1.3.2)
\end{aligned}$$

Formule (1.3.2) is symmetrisch in de argumenten x_0, x_1, \dots, x_n , zodat $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$ onafhankelijk is van de volgorde waarin $x_0 \dots x_n$ worden genomen.

Zo is $f[x_1, x_2, x_3, x_4] = f[x_4, x_1, x_2, x_3] = f[x_1, x_3, x_2, x_4]$ enz.

Voorb. 2 : In voorbeeld 1 was berekend $f[4, 3, 6] = 13$.

Bereken $f[3, 6, 4]$,

$$\begin{aligned}
f[6, 4] &= \frac{64 - 216}{4 - 6} = 76, \quad f[3, 6] = \frac{216 - 27}{6 - 3} = 63, \quad \text{en } f[3, 6, 4] = \\
&= \frac{f[6, 4] - f[3, 6]}{4 - 3} = 13.
\end{aligned}$$

Tussen de gedeelde differenties en de afgeleiden van een functie bestaat een nauw verband.

Is $f(x)$ differentieerbaar, dan geldt volgens de middelwaardstelling

$$f(x_1) - f(x_0) = (x_1 - x_0) f'(\xi) \quad \text{met } \xi \text{ tussen } x_0 \text{ en } x_1.$$

$$\text{Dus } f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f'(\xi).$$

Algemener geldt de stelling : is $f(x)$ n -maal differentieerbaar, dan is

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi) \quad (1.3.3)$$

met $\min.(x_0, \dots, x_n) < \xi < \max.(x_0, \dots, x_n)$.

Bewijs : Beschouw de functie

$$F(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n) \{f[x, x_1, x_2, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_n]\}$$

We zien direct $F(x_0) = 0$.

Verder volgt uit formule (1.3.2) dat

$$(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n) f[x, x_1, \dots, x_n] = f(x) - f^*(x).$$

Hierin is $f^*(x)$ een veelterm van de graad $n - 1$, waarvoor geldt $f^*(x_i) = f(x_i)$ voor $i = 1, \dots, n$.

$$\text{Dus } F(x) = f(x) - f^*(x) - (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n) f[x_0, x_1, \dots, x_n]$$

$$\text{met } F(x_0) = F(x_1) = \dots = F(x_n) = 0. \quad (1.3.4)$$

De stelling van Rolle zegt nu :

$F'(x)$ heeft minstens n nulpunten n.l. tussen x_0 en x_1 , x_1 en x_2 enz.

Dus $F''(x)$ heeft minstens $n - 1$ nulpunten. Zo verder redenerend vindt men $F^{(n)}(x)$ heeft minstens één nulpunt ξ , gelegen tussen het minimum en het maximum van x_0, x_1, \dots, x_n .

(1.3.4) n maal differentieren geeft

$$F^{(n)}(x) = f^{(n)}(x) - n!f[x_0, x_1, \dots, x_n].$$

Substitueer $x = \xi$, dan komt er

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi).$$

Gevolg : Is $f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$, dan is

$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = a_n$ en alle hogere differenties zijn nul (vgl. voorbeeld 1)

Wat gebeurt er als 2 of meer basispunten samenvallen ?

Men kan de definitie van gedeelde differenties niet zonder meer toepassen, omdat de noemer nul wordt. We moeten dus de limiet nemen.

$$\text{Zo is } f[x, x] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} f[x, x + \epsilon] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \epsilon) - f(x)}{\epsilon} = f'(x).$$

De eerste differentie wordt dus vervangen door de eerste afgeleide. Evenzo geeft (1.3.3) onmiddellijk

$$f[x, x, \dots, x] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(x). \quad (1.3.5)$$

$n + 1$ maal

Voorbeeld 3 :

Van $f(x)$ is gegeven $f(1) = 1$, $f'(1) = 3$ en $f''(1) = 6$; $f(3) = 27$, $f(4) = 64$.

Maak differentietabel.

Neem basispunt $x = 1$ nu 3-voudig, $f[1, 1] = 3$ en $f[1, 1, 1] = \frac{6}{2} = 3$.

We krijgen dan

	x	$f(x)$			
x_0	1	1			
			3		
x_0	1	1	3	1	
			3	5	0
x_0	1	1	13	1	9
			13	8	
x_1	3	27	37		
			37		
x_2	4	64			

4. Formule van Newton

We behandelen nu een methode, waarmee het mogelijk is het interpolatiepolynoom stapsgewijs op te bouwen. Bij elke stap wordt een nieuw basispunt toegevoegd.

$$\text{We hebben } f[x, x_0] = \frac{f(x_0) - f(x)}{x_0 - x}$$

$$\text{dus } f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x, x_0]. \quad (1.4.1)$$

$$\text{Nu is } f[x, x_0, x_1] = \frac{f[x_0, x_1] - f[x, x_0]}{x_1 - x}$$

$$\text{of } f[x, x_0] = f[x_0, x_1] + (x - x_1) f[x, x_0, x_1].$$

Substitueren in (1.4.1) geeft

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x, x_0, x_1]. \quad (1.4.2)$$

Hierin is $f_1^*(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1]$ het interpolatiepolynoom van de eerste graad door x_0 en x_1 , immers $f(x) = f_1^*(x)$ voor $x = x_0, x_1$.

Verder is $R_2(x) = (x - x_0)(x - x_1) f[x, x_0, x_1]$ de restterm bij lineaire interpolatie.

We voegen nu het nieuwe basispunt x_2 toe.

$$\text{UIT } f[x, x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_0, x_1, x_2] - f[x, x_0, x_1]}{x_2 - x}$$

volgt :

$$f[x, x_0, x_1] = f[x_0, x_1, x_2] + (x - x_2) f[x, x_0, x_1, x_2].$$

Substitueren in (1.4.2) geeft

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2] + \\ + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) f[x, x_0, x_1, x_2].$$

De eerste drie termen van het rechterlid vormen het interpolatiepolynoom van de 2e graad door x_0, x_1 en x_2 , want $f(x) = f_2^*(x)$ voor $x = x_0, x_1, x_2$.

De restterm $R_3(x)$ bij kwadratische interpolatie is dus

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

We kunnen dit proces voortzetten. Zo vinden we de formule van Newton :

$$f(x) = f_n^*(x) + R_{n+1}(x) = \\ f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2] + \dots \\ + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) f[x_0, x_1, \dots, x_n] + R_{n+1}(x) \quad (1.4.4)$$

$$\text{met } R_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]. \quad (1.4.5)$$

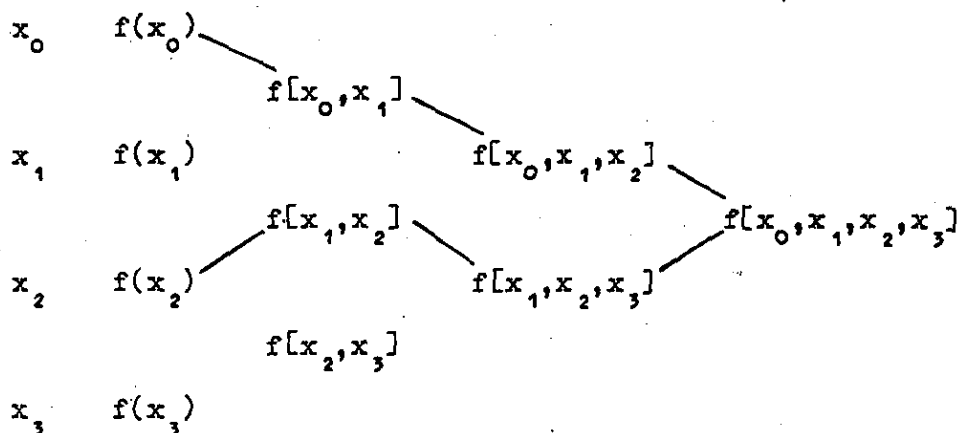
$f_n^*(x)$ is het interpolatiepolynoom van de n^{de} graad door

x_0, x_1, \dots, x_n , want

$$f_n^*(x) = f(x) \text{ voor } x = x_0, x_1, \dots, x_n.$$

Aangezien $f_n^*(x)$ eenduidig bepaald is (zie § 2), zijn de formules van Lagrange en van Newton equivalent. Beiden hebben dus ook dezelfde restterm.

Om de gedeelde differenties in (1.4.4) te berekenen maken we weer een differentietabel.



Volgen we de bovenste lijn, dan vinden we formule (1.4.4)

$$\begin{aligned}
 f^*(x) = & f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] + \\
 & + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)f[x_0, x_1, x_2, x_3].
 \end{aligned} \tag{1.4.6}$$

Bij de afleiding van de formule van Newton is echter de volgorde, waarin de basispunten worden ingevoerd niet van belang. We kunnen b.v. ook de zig-zaglijn volgen, d.w.z. we kiezen de basispunten in de volgorde x_2, x_1, x_3, x_0 . Dit geeft

$$\begin{aligned}
 f^*(x) = & f(x_2) + (x - x_2)f[x_1, x_2] + (x - x_1)(x - x_2)f[x_1, x_2, x_3] + \\
 & + (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)f[x_0, x_1, x_2, x_3].
 \end{aligned} \tag{1.4.7}$$

(1.4.6) en (1.4.7) geven dezelfde veelterm door x_0, x_1, x_2, x_3 . We kunnen op deze manier een aantal interpolatieformules opschrijven. Laten we in beide formules de laatste differentie weg, dan geeft (1.4.6) het polynoom door x_0, x_1 en x_2 en (1.4.7) het polynoom door x_1, x_2 en x_3 . Moeten we interpoleren tussen x_0 en x_2 , dan nemen we in dit geval (1.4.6). In het algemeen gebruiken we de differenties, die zo dicht mogelijk bij het interpolatiepunt liggen.

Voorbeeld 1 : Van $\sinh x$ is gegeven de tabel :

x	0.00	0.20	0.30	0.50
$\sinh x$	0.00000	0.20134	0.30452	0.52110

Bereken $\sinh 0.23$.

x	sinh x			
0.00	0.00000			
		1.0067		
0.20	0.20134		0.08367	
		1.0318		0.1733
0.30	0.30452		0.17033	
		1.0829		
0.50	0.52110			

We volgen de zig-zaglijn en vinden

$$\begin{aligned}
 f^*(0.23) &= 0.20134 + (0.03)(1.0318) + (0.03)(-0.07)(0.08367) \\
 &\quad + (0.03)(-0.07)(0.23)(0.1733) \\
 &= 0.20134 + 0.030954 - 0.000176 - 0.000084 = 0.23203.
 \end{aligned}$$

De waarden van $\sinh x$ zijn gegeven in 5 decimalen. In de berekening is 1 decimaal meer meegenomen om afrondingsfouten tegen te gaan. Het eindresultaat is weer afgerond op 5 decimalen.

Afgerond op 5 decimalen is $\sinh 0.23 = 0.23203$;

Lineaire interpolatie geeft 0.23229 ;

Kwadratische interpolatie geeft 0.23212.

Laat men alle basispunten samenvallen, dan ziet men, onder gebruikmaking van (1.3.5), dat de formule van Newton overgaat in

$$\begin{aligned}
 f(x) &= f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{1!} f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} f''(x_0) + \dots + \\
 &\quad + \frac{(x - x_0)^n}{n!} f^{(n)}(x_0) + R_{n+1},
 \end{aligned}$$

de formule van Taylor.

Door basispunten te laten samenvallen kan men bij de interpolatie ook gebruik maken van afgeleiden.

Voorbeeld 2 ; Construeer het polynoom, dat voldoet aan de gegevens van voorbeeld 3 van § 3.

We gebruiken de differentietabel en kunnen onmiddellijk opschrijven :

$$\begin{aligned}
 f(x) &= f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_0] + (x - x_0)^2 f[x_0, x_0, x_0] + \\
 &\quad + (x - x_0)^3 f[x_0, x_0, x_0, x_1] = \\
 &= 1 + (x - 1) \cdot 3 + (x - 1)^2 \cdot 3 + (x - 1)^3 \cdot 1 = x^3.
 \end{aligned}$$

5. Restterm

Voor de restterm $R_{n+1}(x)$ bij n^{de} orde interpolatie hebben we in § 4 gevonden

$$R_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) f[x, x_0, x_1, \dots, x_n]. \quad (1.5.1)$$

Door formule (1.3.3) toe te passen kan men hiervoor schrijven

$$R_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad (1.5.2)$$

Hierbij ligt ξ tussen het minimum en het maximum van x, x_0, x_1, \dots, x_n .

Voorbeeld 1. Lineaire interpolatie tussen de basispunten x_0 en x_1 ,
dus $f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + R_2(x)$.

$$R_2(x) = (x - x_0)(x - x_1) \frac{f''(\xi)}{2!}.$$

Voor $x_0 < x < x_1$ is $|(x - x_0)(x - x_1)|$ maximaal $\frac{1}{8}(x_1 - x_0)^2$.

Is nu $|f''(x)| < M$ voor $x_0 < x < x_1$, dan is dus

$$|R_2| < \frac{1}{8} (x_1 - x_0)^2 \cdot M.$$

Bij de interpolatie is er nog een andere foutenbron, nl. de afrondingsfouten. De functiewaarden in een mathematische tabel zijn afgerond op n decimalen. Wat is hiervan de invloed op het interpolatieresultaat?

Stel $p = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$, dan is

$$f(x) = (1 - p) f(x_0) + p f(x_1).$$

$f(x_0)$ en $f(x_1)$ hebben beiden een fout $\epsilon < \frac{1}{2} \cdot 10^{-n}$. De fout in $f(x)$ is dus maximaal $(1-p)\epsilon + p\epsilon = \epsilon$. Afronding van $f(x)$ op n decimalen geeft nogmaals een fout ϵ . Dus de totale fout in $f(x)$ kan 2ϵ bedragen, d.w.z. een eenheid in de laatste decimaal. Deze afrondingsfout treedt dus ook op als R_2 geheel te verwaarlozen is.

Voorbeeld 2 :

We bekijken nogmaals voorbeeld 1 van § 4. Bij kwadratische interpolatie voor $x = 0.23$ is

$$\begin{aligned} R_2(0.23) &= \frac{1}{3!} (0.23 - 0.00)(0.23 - 0.20)(0.23 - 0.30) \cosh \xi = \\ &= - 0.0000805 \cosh \xi, \end{aligned}$$

met $0 < \xi < 0.30$, dus

$$1 < \cosh \xi < 1.0453.$$

Dus $- 0.0000842 < R_2(0.23) < - 0.0000805$.

Bij kwadratische interpolatie zal de fout in eenheden van de laatste decimaal dus $- 8$ zijn.

In feite was de fout $- 9$. Het verschil is een gevolg van afrondingsfouten in de getabelleerde functiewaarden.

Meestal kunnen we (1.5.2) niet gebruiken, omdat $f^{(n+1)}(x)$ niet bekend is, of omdat de berekening ervan te omslachtig wordt. Zijn van $f(x)$ alleen de waarden in de tabel bekend, dan kunnen we in principe niets over $R_{n+1}(x)$ zeggen. We kunnen immers tussen de basispunten aan $f(x)$ elke willekeurige waarde toekennen.

Veronderstellen we dat $f(x)$ een "gladde" functie is, d.w.z. dat de afgeleiden langzaam variëren, dan is $f[x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}]$ te gebruiken als benadering van $f[x_0, x_1, \dots, x_n, x]$ en kunnen we $R_{n+1}(x)$ volgens (1.5.1) schatten door

$$(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) f[x_0, x_1, \dots, x_{n+1}].$$

Dit is echter de eerste verwaarloosde term in de formule van Newton. Bij de berekening nemen we dus in de formule van Newton zoveel termen, tot ze voldoende klein zijn geworden.

Dit is een praktisch voordeel van de formule van Newton boven die van Lagrange.

Bij Lagrange moeten we de orde van de interpolatie van te voren vastleggen en geeft de berekening ons geen indruk van de bereikte nauwkeurigheid.

Willen we overgaan tot een hogere orde interpolatie, dan moet bij Lagrange de berekening weer geheel opnieuw worden uitgevoerd. Bij Newton behoeft slechts een nieuwe term te worden toegevoegd.

6. Aitken's Interpolatiemethode

Aitken heeft een zeer praktische interpolatiemethode ontworpen. Evenals bij Newton wordt hierbij het interpolatiepolynoom stapsgewijs opgebouwd.

De lineaire interpolatie kan worden geschreven in de vorm

$$f^*(x) = \frac{1}{x_1 - x_0} \begin{vmatrix} f(x_0) & x_0 - x \\ f(x_1) & x_1 - x \end{vmatrix} \quad (1.6.1)$$

We voeren nu de volgende notatie in :

$f_{0,1,2,\dots,n}(x)$ is het n^{de} graadspolynoom door de basispunten x_0, x_1, \dots, x_n .

In deze notatie wordt (1.6.1)

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

en $f_{1,2}(x) = \frac{1}{x_2 - x_1} \begin{vmatrix} f_1 & x_1 - x \\ f_2 & x_2 - x \end{vmatrix}.$

Beschouw nu

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

$p(x)$ is een veelterm van de tweede graad.

Verder is $p(x_0) = f_{0,1}(x_0) = f(x_0)$ en

$$p(x_2) = f_{1,2}(x_2) = f(x_2)$$

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

$$= f(x_1).$$

Dus $p(x) = f_{0,1,2}(x)$.

We krijgen dus het 2e orde interpolatiepolynoom $f_{0,1,2}(x)$ door lineaire interpolatie toe te passen op $f_{0,1}(x)$ en $f_{1,2}(x)$.

We kunnen dit proces herhalen.

Men heeft b.v.

$$f_{0,1,2,3,4,5}(x) = \frac{1}{x_5 - x_4} \begin{vmatrix} f_{0,1,2,3,4}(x) & x_4 - x \\ f_{0,1,2,3,5}(x) & x_5 - x \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{1}{x_4 - x_2} \begin{vmatrix} f_{0,1,2,3,5}(x) & x_2 - x \\ f_{0,1,3,4,5}(x) & x_4 - x \end{vmatrix}$$

Het 5e graads interpolatiepolynoom wordt zo door lineaire interpolatie verkregen uit 2 verschillende 4e graads interpolatiepolynomen.

De berekening wordt overzichtelijk gerangschikt in het volgende schema :

x_0	f_0				$x_0 - x$
x_1	f_1	$f_{0,1}$			$x_1 - x$
x_2	f_2	$f_{0,2}$	$f_{0,1,2}$		$x_2 - x$
x_3	f_3	$f_{0,3}$	$f_{0,1,3}$	$f_{0,1,2,3}$	$x_3 - x$

$f_{0,1,3}(x)$ wordt b.v. berekend als

$$\frac{1}{(x_3 - x) - (x_1 - x)} \begin{vmatrix} f_{0,1} & x_1 - x \\ f_{0,3} & x_3 - x \end{vmatrix}$$

Voorbeeld : We berekenen nogmaals $\sinh(0.23)$. (zie voorbeeld 1 van § 4)

x	f(x)				
0.20	0.20134				- 3
0.30	0.30452	0.232294			7
0.00	0.00000	1541	0.232118		-23
0.50	0.52110	3316	1936	0.232034	27

De omrande waarde 0.231936 wordt berekend als

$$23 + \frac{1}{27 - 7} \begin{vmatrix} 2294 & 7 \\ 3316 & 27 \end{vmatrix}$$

We zien $\sinh(0.23) \approx 0.232034$. Hierbij is de 4e decimaal vrijwel zeker goed, de 5e decimaal is nog twijfelachtig. Voegen we 0.60 toe als basispunt, dan krijgen we nog de volgende rij erbij :

0.60 0.63665 0.233988 0.231899 0.232034 0.232034 37

De 5e decimaal blijkt ook goed te zijn. Dus $\sinh(0.23) = 0.23203$.

Opm. : De basispunten staan niet in de natuurlijke volgorde. We kiezen als eerste punt 0.20 omdat dit het dichtst bij 0.23 ligt, vervolgens 0.30 enz.

7. Inverse interpolatie

Bij inverse interpolatie is de functiewaarde gegeven en wordt de bijbehorende waarde van het argument gevraagd. Dit kan men doen door de rollen van x en $f(x)$ om te wisselen en een van de behandelde interpolatiemethoden te gebruiken.

Voorbeeld 1 : Gegeven is de tabel

x	0.725	0.726	0.727	0.728
$\sin x$	0.66313544	0.66388361	0.66463111	0.66537795

Bepaal x zodat $\sin x = 0.664$.

We gebruiken Aitken :

$y = \sin x$	x	$y_1 - y$
0.66313544	0.725	-86456
388361	6	-11639
463111	7	63111
537795	8	137795
	0.72615557	
	608	
	0.72615565	
	660	
	5	

Het resultaat is $x = 0.72615565$.

Voorbeeld 2 : Van $f(x) = x^3$ is gegeven de tabel

x	0	1	2	3	4
$f(x)$	0	1	8	27	64

Bepaal x voor $f(x) = 20$.

We passen een 5-punts Lagrange-formule toe.

De Lagrange-coëfficiënten worden

$$L_0 = \frac{(20 - 1)(20 - 8)(20 - 27)(20 - 64)}{(0 - 1)(0 - 8)(0 - 27)(0 - 64)} = 5.07986$$

$$L_1 = -6.44689 ; L_2 = 1.96429 ; L_3 = 0.40656 ; L_4 = -0.00382.$$

De somcontrole geeft 1.00000 en

$$x = (5.07986) \cdot (0) + (-6.44689) \cdot (1) + (1.96429) \cdot (2) + (0.40656) \cdot (3) + (-0.00382) \cdot (4) = -1.31391.$$

Echter $x = \sqrt[3]{20} = 2.7144$. De "blinde" Lagrange interpolatie geeft dus een foutief resultaat.

De oorzaak ligt in het feit dat $\sqrt[3]{x}$ zich in de buurt van $x = 0$ niet als een polynoom gedraagt. Immers de eerste afgeleide wordt oneindig voor $x = 0$.

We kunnen hetzelfde voorbeeld ook met Aitken aanpakken en krijgen

$y = x^3$	x				$y_i - y$
27	3				7
8	2	2.631579			-12
1	1	.461539	2.923077		-19
0	0	.222222	3.245614	-3.205130	-20
64	4	.810811	2.669986	2.846748	-1.313918

Dus weer $x = -1.31392$. Echter uit het verloop van de berekening is duidelijk te zien, dat dit resultaat onbetrouwbaar is, er treedt geen convergentie op.

Dezelfde situatie doet zich ook voor als $f(x)$ in de buurt van het interpolatiepunt een extreem heeft, immers dan is $f'(x) = 0$ en de afgeleide van de inverse functie wordt oneindig.

We laten aan een voorbeeld zien, hoe men in een dergelijk geval te werk kan gaan.

Voorbeeld 3 : Gegeven is de tabel

x	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6
$y = \sin x$	0.93204	0.96356	0.98545	0.99749	0.99957

Bepaal x zodat $\sin x = 0.96968$.

We krijgen de volgende stappen :

- Lineaire inverse interpolatie tussen $y_0 = 0.96356$ en $y_1 = 0.98545$.
Dit geeft als eerste benadering $x' = 1.328$.
- Directe interpolatie b.v. volgens Aitken geeft $f(x') = 0.97067$.
- Lineaire inverse interpolatie tussen $y_0 = 0.96356$ en $y_1' = 0.97067$.
Dit geeft als tweede benadering $x'' = 1.324$.
- Directe interpolatie geeft $f(x'') = 0.96970$.
- Lineaire inverse interpolatie tussen $y_0 = 0.96356$ en $y_1'' = 0.96970$.
Dit geeft als derde benadering $x''' = 1.3239$.

Dus $x = 1.3239$ met onzekerheid in de laatste decimaal

HOOFDSTUK II. INTERPOLATIE BIJ GELIJKE INTERVALLLEN

1. Formule van Lagrange

In dit hoofdstuk behandelen we de interpolatie voor het geval, dat de waarden van het argument equidistant zijn.
Zij h het interval van de tabel. We voeren een nieuwe variabele p in, gedefinieerd door

$$p = \frac{x - x_0}{h} \quad \text{of} \quad x = x_0 + ph. \quad (2.1.1)$$

We onderscheiden nu twee gevallen.

a) De basispunten zijn $x_{-n}, x_{-n+1}, \dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots, x_n$; het aantal is dus oneven.

$$\begin{array}{cccccccc} x & & x & & x & & x & & x & & x & & x \\ -3 & & -2 & & -1 & & 0 & & 1 & & 2 & & 3 \\ \hline -3 & & -2 & & -1 & & 0 & & 1 & & 2 & & 3 \\ & & & & & & & & & & & & p \end{array}$$

Volgens (1.2.2) is

$$L_i^{(2n+1)}(x) = \frac{(x - x_{-n})(x - x_{-n+1}) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_{-n})(x_i - x_{-n+1}) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)}$$

Substitueren van $x = x_0 + ph$ geeft

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

Dit kan men nog verder herleiden tot

$$L_i^{(2n+1)}(p) = (-1)^{n+i} \frac{\prod_{j=0}^{2n} (p - n + j)}{(n+i)!(n-i)!(p-i)} \quad (2.1.2)$$

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

Men kiest de basispunten symmetrisch om het interpolatiepunt. Een $(2n + 1)$ -punts formule zal men dus meestal gebruiken voor interpolatie in het interval $x_0 - \frac{1}{2}h < x < x_0 + \frac{1}{2}h$ d.w.z. voor $-\frac{1}{2} < p < \frac{1}{2}$.

b) De basispunten zijn $x_{-n+1}, x_{-n+2}, \dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots, x_n$; het aantal is dus even.

x_{-2}	x_{-1}	x_0	x_1	x_2	x_3	x
-2	-1	0	1	2	3	p

Men vindt nu

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

of

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

Een $2n$ -punts formule wordt gebruikt voor interpolatie in het interval $x_0 < x < x_1$, dus voor $0 < p < 1$.

De Lagrange coëfficiënten $L_i^{(n)}(p)$ zijn getabellgd. Een uitgebreide tabel is N.B.S. Columbia Press Series, vol 4. In Chambers' Six Figure Math. Tables vol. 2 vindt men Lagrange coëfficiënten voor 4 en 6-punts formules met $p = 0(0.01)1$.

De 3-punts formule (kwadratische interpolatie) is

$$f(x_0 + ph) = L_{-1}^{(3)}(p) f(x_{-1}) + L_0^{(3)}(p) f(x_0) + L_1^{(3)}(p) f(x_1).$$

Ter illustratie geven we een tabel van $L_{-1}^{(3)}, L_0^{(3)}$ en $L_1^{(3)}$ voor $p = -0.5(0.1)0.5$.

p	$L_{-1}^{(3)}(p)$	$L_0^{(3)}(p)$	$L_1^{(3)}(p)$	
0.0	0	1	0	0.0
0.1	- 0.045	0.99	0.055	- 0.1
0.2	- 0.08	0.96	0.12	- 0.2
0.3	- 0.105	0.91	0.195	- 0.3
0.4	- 0.12	0.84	0.28	- 0.4
0.5	- 0.125	0.75	0.375	- 0.5

	$L_1^{(3)}(p)$	$L_0^{(3)}(p)$	$L_{-1}^{(3)}(p)$	p
--	----------------	----------------	-------------------	---

Voor negatieve waarden van p gaat men uit van de rechterkolom en de onderste rij. Dit berust op de relatie

$$L_i^{(2n+1)}(p) = L_{-i}^{(2n+1)}(-p)$$

Deze betrekking volgt onmiddellijk uit (2.1.2). Vervanging van p door -p en i door -i heeft geen invloed.

Voorbeeld:

x	1.00	1.10	1.20	1.30
sin x	0.8415	0.8912	0.9320	0.9636

Bereken sin 1.24 met een 3-punts formule.

We kiezen $x_0 = 1.20$, dan is $p = \frac{0.04}{0.10} = 0.4$

$$f^*(1.24) = (-0.12)(0.8912) + (0.84)(0.9320) + (0.28)(0.9636) = 0.945744.$$

Afgerond op 4 dec. $\sin 1.24 = 0.9457$.

Een sinustafel geeft $\sin 1.24 = 0.94578$.

2. Differenties

Wanneer de basispunten equidistant zijn, is het niet praktisch met gedeelde differenties te werken. Immers bij de berekening hiervan moet men delen door factoren van de vorm $x_i - x_j$. Dit zijn echter steeds veelvoudigen van het interval h. Het is beter deze deling achterwege te laten en te werken met differenties.

De functiewaarde $f(x_i)$ in een punt x_i van de tabel zullen we aangeven met f_i of y_i .

De verschillen $f_{i+1} - f_i$ heten de eerste differenties. De verschillen van deze eerste differenties heten tweede differenties, etc.

Men gebruikt voor deze differenties drie notaties :

a) voorwaartse differenties

$$\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$$

$$\Delta^2 f_i = \Delta f_{i+1} - \Delta f_i$$

$$\Delta^n f_i = \Delta^{n-1} f_{i+1} - \Delta^{n-1} f_i$$

b) achterwaartse differenties

$$\nabla f_i = f_i - f_{i-1}$$

$$\nabla^2 f_i = \nabla f_i - \nabla f_{i-1}$$

$$\nabla^n f_i = \nabla^{n-1} f_i - \nabla^{n-1} f_{i-1}$$

c) centrale differenties

$$\delta f_i = f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}$$

$$\delta^2 f_i = \delta f_{i+\frac{1}{2}} - \delta f_{i-\frac{1}{2}}$$

$$\delta^n f_i = \delta^{n-1} f_{i+\frac{1}{2}} - \delta^{n-1} f_{i-\frac{1}{2}}$$

De differenties worden overzichtelijk gerangschikt in een schema, de differentietabel.

x	$f(x)$			
x_{-2}	f_{-2}		$\Delta^2 f_{-3}$	
		Δf_{-2}		$\Delta^3 f_{-3}$
x_{-1}	f_{-1}		$\Delta^2 f_{-2}$	
		Δf_{-1}		$\Delta^3 f_{-2}$
x_0	f_0		$\Delta^2 f_{-1}$	
		Δf_0		$\Delta^3 f_{-1}$
x_1	f_1		$\Delta^2 f_0$	
		Δf_1		$\Delta^3 f_0$
x_2	f_2		$\Delta^2 f_1$	

Voorwaartse differenties

Differenties met dezelfde onderindex liggen op een voorwaartse diagonaal.

x	$f(x)$			
x_{-2}	f_{-2}		$\nabla^2 f_{-1}$	
		∇f_{-1}		$\nabla^3 f_0$
x_{-1}	f_{-1}		$\nabla^2 f_0$	
		∇f_0		$\nabla^3 f_1$
x_0	f_0		$\nabla^2 f_1$	
		∇f_1		$\nabla^3 f_2$
x_1	f_1		$\nabla^2 f_2$	
		∇f_2		$\nabla^3 f_3$
x_2	f_2		$\nabla^2 f_3$	

Achterwaartse differenties

Differenties met dezelfde onderindex liggen op een achterwaartse diagonaal.

x	$f(x)$				
x_{-2}	f_{-2}		$\delta^2 f_{-2}$		$\delta^4 f_{-2}$
		$\delta f_{-\frac{3}{2}}$		$\delta^3 f_{-\frac{3}{2}}$	
x_{-1}	f_{-1}		$\delta^2 f_{-1}$		$\delta^4 f_{-1}$
		$\delta f_{-\frac{1}{2}}$		$\delta^3 f_{-\frac{1}{2}}$	
x_0	f_0	————— $\delta^2 f_0$ —————		————— $\delta^4 f_0$ —————	
		$\delta f_{\frac{1}{2}}$		$\delta^3 f_{\frac{1}{2}}$	
x_1	f_1		$\delta^2 f_1$		$\delta^4 f_1$
		$\delta f_{\frac{3}{2}}$		$\delta^3 f_{\frac{3}{2}}$	
x_2	f_2		$\delta^2 f_2$		$\delta^4 f_2$

Centrale differenties

Differenties met dezelfde onderindex liggen op een horizontale lijn.

Merk op dat $\delta f_{\frac{1}{2}} = f_{\frac{3}{2}} - f_{-\frac{1}{2}}$ in de differentietabel niet voorkomt en ook niet kan worden berekend, als van $f(x)$ alleen een tabel is gegeven.

Algemeen geldt dit voor $\delta^{2n+1} f_{\frac{1}{2}}$ (i geheel).

Voorbeeld 1 :

$f(x) = x^3 \quad x = 1(1)5$

x	$f(x)$				
$x_{-2} = 1$	1				
			7		
$x_{-1} = 2$	8		12		
		19		6	
$x_0 = 3$	27		18		0
		37		6	0
$x_1 = 4$	64		24		0
		61		6	
$x_2 = 5$	125		30		
		91			
$x_3 = 6$	216				

6

De omrande derde differentie is in de drie notaties resp. $\Delta^3 f_0$, $\nabla^3 f_1$, en $\delta^3 f_{\frac{1}{2}}$.

Opm.1 Als er geen verwarring mogelijk is, schrijft men voor $\Delta^n f_i$ vaak kort Δ^n . Evenzo schrijft men ∇^n en δ^n .

Opm.2 In principe kan men met één notatie voor de differenties volstaan. De formules worden echter overzichtelijker, als men de notatie aanpast aan de aard van het probleem, zoals in de volgende paragrafen nog zal blijken.

De differenties kunnen natuurlijk uitgedrukt worden in de functiewaarden. Zo is bv.

$$\delta^2 f_0 = \delta f_{\frac{1}{2}} - \delta f_{-\frac{1}{2}} = (f_1 - f_0) - (f_0 - f_{-1}) = f_1 - 2f_0 + f_{-1}$$

$$\Delta^2 f_0 = \Delta f_1 - \Delta f_0 = (f_2 - f_1) - (f_1 - f_0) = f_2 - 2f_1 + f_0$$

$$\Delta^3 f_0 = \Delta^2 f_1 - \Delta^2 f_0 = f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0.$$

Met volledige inductie bewijst men

$$\Delta^n f_0 = \sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{n}{i} f_{n-i} \quad (2.2.1)$$

Het verband met gedeelde differenties is ook eenvoudig. Men vindt bv.

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{1}{h} \Delta f_i = \frac{1}{h} \nabla f_{i+1} = \frac{1}{h} \delta f_{i+\frac{1}{2}}$$

$$\begin{aligned} f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] &= \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i} = \\ &= \frac{1}{2h} \left(\frac{1}{h} \Delta f_{i+1} - \frac{1}{h} \Delta f_i \right) = \frac{1}{2h^2} \Delta^2 f_i = \frac{1}{2h^2} \nabla^2 f_{i+2} = \frac{1}{2h^2} \delta^2 f_{i+1}. \end{aligned}$$

Met volledige inductie bewijst men :

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n}] = \frac{1}{n!h^n} \Delta^n f_i \quad (2.2.2)$$

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n}] = \frac{1}{n!h^n} \nabla^n f_{i+n} \quad (2.2.3)$$

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n}] = \frac{1}{n!h^n} \delta^n f_{i+\frac{n}{2}} \quad (2.2.4)$$

Tenslotte gaan we nog na, welke invloed de grootte van het interval h heeft op de differenties.

Is $f(x)$ n -maal differentieerbaar, dan hebben we volgens formule (1.3.3) :

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n}] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi)$$

Hieruit volgt dus

$$\Delta^n f_i = h^n f^{(n)}(\xi) \quad (2.2.5)$$

met $x_i < \xi < x_{i+n}$

We zien dat $\Delta^n f_i$ van de orde h^n is. Zijn de afgeleiden niet te groot en is h klein, dan nemen de differenties met toenemende orde snel af. De invloed van de grootte van het interval is nu ook duidelijk. Wordt het interval bv. gehalveerd, dan worden de differenties van orde n ongeveer een factor $\frac{1}{2^n}$ kleiner.

Opmerking : Uit (2.2.5) volgt, dat voor een polynoom van de graad n de differenties van orde n constant zijn. Alle hogere differenties zijn nul. (zie voorbeeld 1).

Voorbeeld 2 :

$$f(x) = x^3 \quad x = 1.0(0.5)3.0$$

x	f(x)				
1.0	1				
		2.375			
1.5	3.375		2.25		
		4.625		0.75	
2.0	8		3.00		0
		7.625		0.75	
2.5	15.625		3.75		
		11.375			
3.0	27				

Vergelijk dit met voorbeeld 1.

3. Eenvoudige toepassingen van differenties

a) Polynoomopbouw

We lichten dit toe aan een voorbeeld.

Gevraagd wordt $f(x) = x^3 - 5x^2 + 6x + 1$ te berekenen voor $x = 0(0.01)0.1$ in 4 decimalen.

We berekenen eerst $f(x)$ voor $x = -0.02(0.01)0.02$ (eenvoudige startwaarden) en berekenen vervolgens het deel van de differentietabel boven de aangegeven diagonaal. Zo krijgen we de startdifferenties. We weten dat de derde differenties constant zijn (polynoom van graad 3). Op grond hiervan kan men nu de rest van de tabel worden berekend door herhaalde optelling. Uit de derde differenties berekenen we de tweede differenties etc.

x	f(x)	Δ	Δ^2	Δ^3	f(x) afgerond
-0.02	0.877992				,0.8780
		61507			
-0.01	0.939499		-1006		0.9395
		60501		6	
0	1.000000		-1000		1.0000
		59501		6	
0.01	1.059501		- 994		1.0595
		58507		6	
0.02	1.118008		- 988		1.1180
		57519		6	
0.03	1.175527		- 982		1.1755
		56537		6	
0.04	1.232064		- 976		1.2321
		55561		6	
0.05	1.287625		- 970		1.2876
		54591			
0.10	1.551000				1.5510

Opmerking 1 : Voor de start zijn slechts 4 functiewaarden nodig. We nemen er echter 5, omdat het gelijk zijn van de derde differenties een controle op de berekening geeft. Evenzo kan men $f(0.10)$ direct berekenen. Dit geeft controle op de gehele berekening.

Opmerking 2 : Het resultaat wordt verlangd in 4 decimalen nauwkeurig. De derde differentie is slechts 6 eenheden in de zesde decimaal. Toch kan deze differentie niet worden verwaarloosd, omdat dit een systematische afrondingsfout geeft, die in de loop van de berekening zal accumuleren. Bij deze berekening is het nodig alle cijfers mee te nemen en pas het eindresultaat op 4 decimalen af te ronden.

b) Invloed van afrondingsfouten op differenties

x	sin x	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4	Δ^5
1.0	0.84147					
		4974				
1.1	0.89121		-891			
		4083		-40		
1.2	0.93204		-931		8	
		3152		-32		2
1.3	0.96356		-963		10	
		2189		-22		1
1.4	0.98545		-985		11	
		1204		-11		-3
1.5	0.99749		-996		8	
		208		-3		4
1.6	0.99957		-999		12	
		-791		9		
1.7	0.99166		-990			
		-1781				
1.8	0.97385					

De waarden van $\sin x$ zijn afgerond op 5 decimalen. Deze afrondingsfouten planten zich voort in de differentietabel. Het onregelmatige verloop van de vierde differenties moet hieraan worden toegeschreven. De vijfde differenties zijn niet meer significant. Het heeft dus geen zin hogere differenties te berekenen.

Het ongunstigste geval doet zich voor, als de afrondingsfouten in de functiewaarden afwisselend $\frac{1}{2}$ en $-\frac{1}{2}$ eenheid van de laatste decimaal zijn.

0.5				
	-1			
-0.5		2		
	1		-4	
0.5		-2		8
	-1		4	
-0.5		2		
	1			
0.5				

Men ziet uit deze differentietabel, dat de fout in de n -de differentie maximaal $\pm 2^{n-1}$ eenheden is. In de praktijk zal de fout altijd kleiner zijn, omdat een dergelijke verdeling van de afrondingen zeer onwaarschijnlijk is.

c) Controle van tabellen.

We zullen eens nagaan hoe een fout e in een functiewaarde zich voortplant in de differentietabel.

0	0	0	0
0	0	0	0
0	0	0	e
0	0	e	e
0	e	e	$-4e$
e	e	$-3e$	$6e$
e	$-2e$	$3e$	$6e$
0	$-e$	$3e$	$-4e$
0	0	$-e$	$-e$
0	0	0	e
0	0	0	0
0	0	0	0

Merk op, dat in elke kolom juist de binomiaalcoëfficiënten voorkomen. Vergelijk dit met formule (2.2.1) De invloed van de fout neemt toe met de orde van de differentie. Men kan dit gebruiken om in een tabel fouten op te sporen en zo mogelijk te corrigeren.

Voorbeeld :

(zie volgende blad)

x	f(x)	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
0	358				
		12			
1	370		15		
		27		12	
2	397		27		-1
		54		11	
3	451		38		-1
		92		10	
4	543		48		-1
		140		9	
5	683		57		-19
		197		-10	
6	880		47		71
		244		61	
7	1124		108		-109
		352		-48	
8	1476		60		71
		412		23	
9	1888		83		-19
		495		4	
10	2383		87		-1
		582		3	
11	2965		90		
		672			
12	3637				

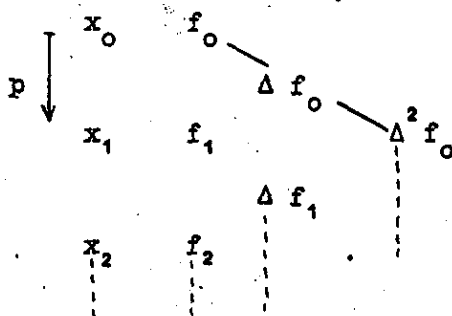
Uit het onregelmatige verloop van de hogere differenties blijkt duidelijk de aanwezigheid van een fout en wel in $f(7)$. De vierde differenties moeten blijkbaar -1 zijn. De fout in opvolgende vierde differenties is $-18, 72, -108, 72$ en -18 , dus $e = -18$. De gecorrigeerde waarde van $f(7)$ wordt 1142 . Dit wijst op een verwisseling van 2 cijfers, een veel voorkomende fout.

Opmerking : Uit de differentietabel blijkt de aanwezigheid van toevallige fouten. Systematische fouten hoeven op deze manier niet voor de dag te komen.

4. Interpolatieformules van Newton-Gregory

a) Voorwaartse formules

De voorwaartse formule van Newton-Gregory wordt gebruikt aan het begin van een tabel, waar alleen voorwaartse differenties beschikbaar zijn.



De formule van Newton voor gedeelde differenties (§ 4, hdst.I) luidt :

$$f^*(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2] + \dots \quad (2.4.1)$$

Volgens (2.2.2) is $f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{1}{n! h^n} \Delta^n f_0$.

Stel nu $x = x_0 + ph$, dan gaat (2.4.1) over in

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \frac{p}{1!} \Delta f_0 + \frac{p(p-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \frac{p(p-1)(p-2)}{3!} \Delta^3 f_0 + \dots$$

Gebruiken we de notatie voor binomiaalcoëfficiënten

$$\binom{p}{n} = \frac{p(p-1)\dots(p-n+1)}{n!},$$

dan volgt de voorwaartse formule van Newton-Gregory :

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \binom{p}{1} \Delta f_0 + \binom{p}{2} \Delta^2 f_0 + \binom{p}{3} \Delta^3 f_0 + \binom{p}{4} \Delta^4 f_0 + \dots \quad (2.4.2)$$

De eerste $(n+1)$ termen van deze formule geven het interpolatie polynoom van de graad n door de punten x_0, x_1, \dots, x_n .

Voor de restterm vindt men op dezelfde wijze

$$R_{n+1}(x_0 + ph) = \binom{p}{n+1} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi); \quad x_0 < \xi < x_n.$$

Opmerking 1 : Men kan de formule van Newton symbolisch schrijven in de vorm

$$f(x + ph) = (1 + \Delta)^p f(x)$$

Als men $(1 + \Delta)^p$ formeel in een machtreeks ontwikkelt vindt men (2.4.2) terug.

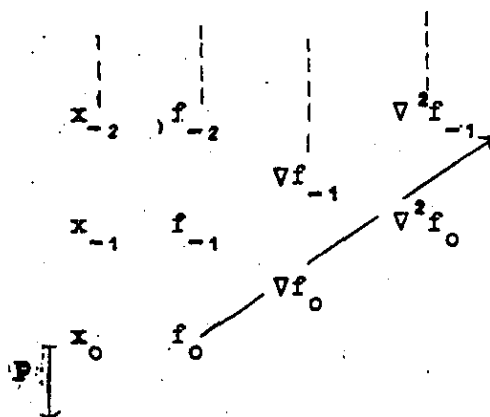
Opmerking 2 : Nemen we in het bijzonder $p = n$ (n geheel) dan breekt (2.4.2) na de $(n + 1)$ -ste term af en

$$f(x_n) = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} \Delta^i f_0. \quad (2.4.3)$$

Hiermee worden dus de functiewaarden in een tabel uitgedrukt in de differenties.

b) Achterwaartse formule.

De achterwaartse formule wordt gebruikt aan het eind van een tabel, waar alleen achterwaartse differenties beschikbaar zijn.



De formule van Newton voor gedeelde differenties is in dit geval

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

Stel weer $x = x_0 + ph$ en gebruik nu (2.2.3), dan volgt na enige herleiding

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 - \binom{-p}{1} \nabla f_0 + \binom{-p}{2} \nabla^2 f_0 - \binom{-p}{3} \nabla^3 f_0 + \binom{-p}{4} \nabla^4 f_0 + \dots \quad (2.4.4)$$

De achterwaartse formule van Newton-Gregory.

Eventueel kan men in deze formule p door $-p$ vervangen.
Dit geeft

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

De binomiaalcoëfficiënten $\binom{p}{n}$ zijn getabelleerd. H.T.Davis, Tables of Higher Mathematical Functions vol.1 geeft tabellen voor $n = 2$ t/m 6 en $p = 0(0.01)1$.

Voorbeeld :

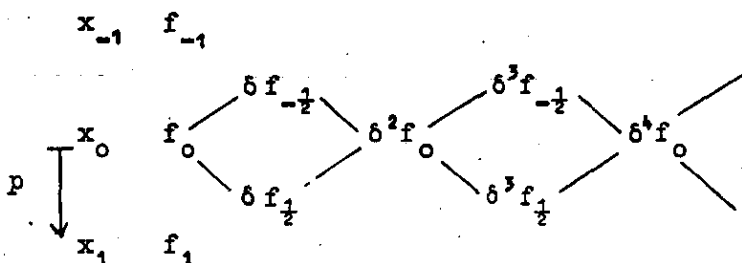
Gegeven is de tabel van $\sin x$ in § 3.
Bereken $\sin 1.02$.

We gebruiken de voorwaartse formule met $x_0 = 1.0$ en $p = \frac{1.02 - 1.0}{0.1} = 0.2$.

	f_0			= 0.84147
	$p\Delta f_0$	0.2	x 4974	= 9948
$\binom{p}{2}$	$\Delta^2 f_0$	-0.08	x (-891)	= 713
$\binom{p}{3}$	$\Delta^3 f_0$	0.048	x (-40)	= -19
$\binom{p}{4}$	$\Delta^4 f_0$	0.034	x 8	= -3
				<u>0.852109</u>
				afgerond op 5 dec. 0.85211

5. Formules van Gauss en Stirling

De formules van Gauss dienen voor interpolatie midden in een tabel, waar dus centrale differenties beschikbaar zijn. Ze worden zelden gebruikt. We zullen er echter de belangrijke formules van Bessel en Everett uit afleiden.



Gebruiken we de differenties op de voorwaartse zig-zaglijn, dan wordt de formule van Newton

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

Substitueren we $x = x_0 + ph$ en gebruiken we formule (2.2.4), dan volgt de voorwaartse formule van Gauss :

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \binom{p}{1} \delta f_{\frac{1}{2}} + \binom{p}{2} \delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3} \delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{4} \delta^4 f_0 + \dots \quad (2.5.1)$$

Neemt men de differenties op de achterwaartse zig-zaglijn, dan vindt men op dezelfde wijze de achterwaartse formule van Gauss :

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \binom{p}{1} \delta f_{-\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{2} \delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3} \delta^3 f_{-\frac{1}{2}} + \binom{p+2}{4} \delta^4 f_0 + \dots \quad (2.5.2)$$

Men kan symmetrie bereiken t.o.v. het punt x_0 als men van beide formules het gemiddelde neemt. Dit geeft na enige herleiding :

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \binom{p}{1} \cdot \frac{1}{2} (\delta f_{\frac{1}{2}} + \delta f_{-\frac{1}{2}}) + \frac{p}{2} \binom{p}{1} \delta^2 f_0 + \\ + \binom{p+1}{3} \cdot \frac{1}{4} (\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \delta^3 f_{-\frac{1}{2}}) + \frac{p}{4} \binom{p+1}{3} \delta^4 f_0 + \dots$$

Met de notatie $\mu f_i = \frac{1}{2}(f_{i+\frac{1}{2}} + f_{i-\frac{1}{2}})$ wordt dit

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \binom{p}{1} \mu \delta f_0 + \frac{p}{2} \binom{p}{1} \delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3} \mu \delta^3 f_0 + \frac{p}{4} \binom{p+1}{3} \delta^4 f_0 + \dots \quad (2.5.3)$$

Dit is de formule van Stirling.

Deze formule is geschikt voor interpolatie in het interval $-\frac{1}{2} < p < \frac{1}{2}$. Ook deze formule vindt weinig praktische toepassing.

Opmerking : $\mu \delta f_0$, $\mu \delta^2 f_{\frac{1}{2}}$, $\mu \delta^3 f_0$ etc. noemt men gemiddelde centrale differenties.

6. Formule van Everett

$$\begin{array}{c}
 p \downarrow \\
 x_0 \quad f_0 \text{ --- } \delta^2 f_0 \text{ --- } \delta^4 f_0 \text{ --- } \delta^6 f_0 \\
 x_1 \quad f_1 \text{ --- } \delta^2 f_1 \text{ --- } \delta^4 f_1 \text{ --- } \delta^6 f_1
 \end{array}$$

De formule van Everett gebruikt alleen de even differenties op de beide horizontale lijnen door x_0 en x_1 .

Deze formule volgt uit de voorwaartse formule van Gauss (2.5.1), door hierin de differenties van oneven orde uit te drukken in die van even orde, immers

$$\delta f_{\frac{1}{2}} = f_1 - f_0$$

$$\delta^3 f_{\frac{1}{2}} = \delta^2 f_1 - \delta^2 f_0 \text{ etc.}$$

Substitueren we dit in (2.5.1), dan komt er

$$\begin{aligned}
 f^*(x_0 + ph) = & (1 - p)f_0 + pf_1 + \left(\binom{p}{2} - \binom{p+1}{3} \right) \delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3} \delta^2 f_1 + \\
 & + \left(\binom{p+1}{4} - \binom{p+2}{5} \right) \delta^4 f_0 + \binom{p+2}{5} \delta^4 f_1 + \dots
 \end{aligned}$$

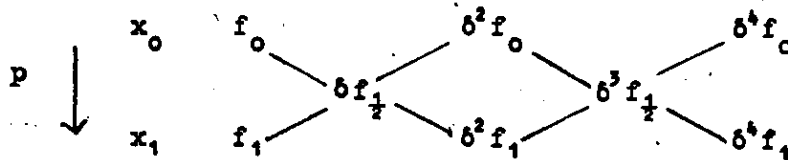
Wegens $\binom{p}{k} - \binom{p+1}{k+1} = -\binom{p}{k+1}$ wordt dit

$$\begin{aligned}
 f^*(x_0 + ph) = & (1 - p)f_0 + pf_1 - \binom{p}{3} \delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3} \delta^2 f_1 - \binom{p+1}{5} \delta^4 f_0 + \\
 & + \binom{p+2}{5} \delta^4 f_1 + \dots \quad (2.6.1)
 \end{aligned}$$

Dit is de formule van Everett.

Geven we de coëfficiënt van $\delta^{2n} f_0$ aan met $E_0^{(2n)}$ en de coëfficiënt van $\delta^{2n} f_1$ met $E_1^{(2n)}$, dan krijgen we :

$$f^*(x_0 + ph) = (1 - p)f_0 + pf_1 + E_0^{(2)} \delta^2 f_0 + E_1^{(2)} \delta^2 f_1 + E_0^{(4)} \delta^4 f_0 + E_1^{(4)} \delta^4 f_1 + \dots \quad (2.6.2)$$

7. Formule van Bessel

De voorwaartse formule van Gauss was

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \binom{p}{1} \delta f_{\frac{1}{2}} + \binom{p}{2} \delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3} \delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{4} \delta^4 f_0 + \dots$$

De achterwaartse formule van Gauss uitgaande van het basispunt x_1 wordt

$$f^*(x_1 + (p-1)h) = f^*(x_0 + ph) = f_1 + \binom{p-1}{1} \delta f_{\frac{1}{2}} + \binom{p}{2} \delta^2 f_1 + \binom{p}{3} \delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{4} \delta^4 f_1 + \dots$$

Het gemiddelde van beide formules wordt

$$f^*(x_0 + ph) = \frac{1}{2}f_0 + \frac{1}{2}f_1 + \frac{1}{2}\left(\binom{p}{1} + \binom{p-1}{1}\right)\delta f_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \frac{1}{2}\left(\binom{p+1}{3} + \binom{p}{3}\right)\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \dots$$

of

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + p \delta f_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \frac{1}{3}(p - \frac{1}{2})\binom{p}{2} \delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{4}\binom{p+1}{4}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \dots \quad (2.7.1)$$

Dit is de formule van Bessel.

Geven we de coëfficiënt van de differenties van orde n aan met $B^{(n)}$, dan wordt de formule

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + p \delta f_{\frac{1}{2}} + B^{(2)}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + B^{(3)} \delta^3 f_{\frac{1}{2}} + B^{(4)}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \dots \quad (2.7.2)$$

Opmerking 1 : Eindigt de formule met de term $B^{(2n)} \left(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1 \right)$ dan is $f^*(x_0 + ph)$ een polynoom van de graad $2n$, dat met $f(x)$ samenvalt in $x_{-n+1}, \dots, x_0, \dots, x_n$. Dit zijn $2n$ punten i.p.v. $2n + 1$.

Opmerking 2 : Als men in de formule van Bessel de oneven differenties door even differenties vervangt, vindt men de formule van Everett terug.

Interpolatie voor $p = \frac{1}{2}$ (halvering van het interval) komt vaak voor. Dan is $B^{(2n+1)} = 0$ en (2.7.1) wordt

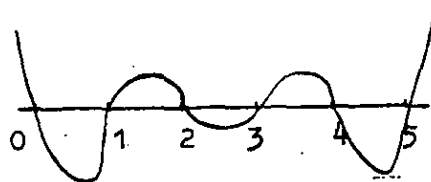
$$f_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(f_0 + f_1) - \frac{1}{16}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \frac{3}{256}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) - \frac{5}{2048}(\delta^6 f_0 + \delta^6 f_1) + \dots \quad (2.7.3)$$

8. Het gebruik van interpolatieformules

De restterm bij n -de orde interpolatie is

$$(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} = \Pi_{n+1}(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}.$$

Voor bv. $n = 5$ ziet de grafiek van de factor $\Pi_{n+1}(x)$ er als volgt uit



(6)

Varieert $f(x)$ weinig in het beschouwde gebied, dan is de restterm minimaal in het interval $x_2 < x < x_4$. Men moet dus de basispunten zoveel mogelijk

symmetrisch om het interpolatiepunt kiezen. Vandaar dat de centrale formules nauwkeuriger zijn dan de formules van Newton van dezelfde orde.

Bovendien is duidelijk dat bij extrapolatie de fout zeer snel kan toenemen.

Voor kwadratische interpolatie gebruikt men Bessel

$$f_p = f_0 + p \delta f_{\frac{1}{2}} + B^{(2)}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1).$$

Voor derde orde interpolatie heeft men

$$f_p = f_0 + p \delta f_{\frac{1}{2}} + B^{(2)}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + B^{(3)} \delta^3 f_{\frac{1}{2}} \quad (\text{Bessel})$$

of
$$f_p = f_0 + p \delta f_{\frac{1}{2}} + E_0^{(2)} \delta^2 f_0 + E_1^{(2)} \delta^2 f_1. \quad (\text{Everett})$$

Everett vereist iets minder werk.

Voor vierde orde interpolatie kan men Everett gebruiken, aangevuld met een Besselterm

$$f_p = f_0 + p \delta f_{\frac{1}{2}} + E_0^{(2)} \delta^2 f_0 + E_1^{(2)} \delta^2 f_1 + B^{(4)} (\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1).$$

Vaak worden in een tabel tevens differenties van even orde gegeven. In een dergelijke tabel interpoleert men met Everett.

Bij de formule van Lagrange hoeft men geen differenties te berekenen. Zoals reeds eerder opgemerkt in hoofdstuk I, heeft Lagrange echter het nadeel, dat men geen indruk krijgt van de bereikte nauwkeurigheid. Hiervoor zou men toch weer differenties moeten berekenen, maar dan kan men beter Bessel of Everett toepassen. Dit bezwaar vervalt als men bij een analytisch gegeven functie iets over de restterm kan zeggen.

Wanneer kan men in de formule van Bessel differenties van orde n verwaarlozen? Dit kunnen we nagaan door het maximum van $|B^{(n)}(p)|$ te bepalen. Zo is bv. $|B^{(2)}|_{\max} = \frac{1}{16}$. De bijdrage van $B^{(2)}(\delta_0^2 + \delta_1^2)$ is dus kleiner dan een halve eenheid van de laatste decimaal als $|\delta^2| < 4$ is. Het resultaat voor hogere differenties is in onderstaande tabel gegeven.

n	$ B^{(n)} _{\max}$	$ \delta^n _{\max}$
2	0.06250	4
3	0.00802	60
4	0.01172	20
5	0.00087	500
6	0.00244	100

Differenties kleiner dan $|\delta^n|_{\max}$ kan men verwaarlozen. Dit geldt ook voor de formule van Everett.

Tabellen van Bessel en Everett coëfficiënten vindt men o.a. in :

- 1) Interpolation and Allied Tables
- 2) Chambers's 6-Figure Math. Tables, vol. 2
- 3) Table of Everett coëff. van Wijngaarden-Dijkstra.

VoorbeeldBereken in onderstaande tabel $f(2/3)$

x	$f(x)$	δf	$\delta^2 f$	$\delta^3 f$	$\delta^4 f$
0.50	2.00000	-18182			
0.55	1.81818	-15151	3031		
0.60	.66667	-12821	2330	-701	203
0.65	.53846	-10989	1832	-498	131
0.70	.42857	-9524	1465	-367	93
0.75	.33333	-8333	1191	-274	63
0.80	.25000	-7353	980	-211	
0.85	1.17647				

$h = 0.05$, $x_0 = 0.65$ en $p = 1/3$; vijfde differenties mogen we verwaarlozen.

Everett

$$\begin{aligned}
 f_0 &= 1.53846 \\
 p\delta_{\frac{1}{2}} &= -36630 \\
 E_0^{(2)}\delta_0^2 &= -1131 \\
 E_1^{(2)}\delta_1^2 &= -723 \\
 B^{(4)}(\delta_0^4 + \delta_1^4) &= 22 \\
 \hline
 &1.499998 \\
 \text{afgerond } &1.50000
 \end{aligned}$$

Bessel

$$\begin{aligned}
 f_0 &= 1.53846 \\
 p\delta_{\frac{1}{2}} &= -36630 \\
 B^{(2)}(\delta_0^2 + \delta_1^2) &= -1832 \\
 B^{(3)}\delta_{\frac{1}{2}}^3 &= -23 \\
 B^{(4)}(\delta_0^4 + \delta_1^4) &= 22 \\
 \hline
 &1.499997 \\
 \text{afgerond } &1.50000
 \end{aligned}$$

Newton

$$\begin{aligned}
 f_0 &= 1.53846 \\
 \binom{P}{1}\Delta_0 &= -36630 \\
 \binom{P}{2}\Delta_0^2 &= -1628 \\
 \binom{P}{3}\Delta_0^3 &= -169 \\
 \binom{P}{4}\Delta_0^4 &= -26 \\
 \hline
 &1.500007 \\
 \text{afgerond } &1.50001
 \end{aligned}$$

Ter vergelijking hebben we ook Newton toegepast. Men ziet dat Bessel iets sneller convergeert dan Newton. Men kan bij Newton de vijfde differentie

nog niet verwaarlozen.

De getabelleerde functie is $\frac{1}{x}$, dus $f(2/3) = 1.5$ exact.

De interpolatiecoëfficiënten voor $p = 1/3$ zijn in dit voorbeeld direct berekend. Gebruikt men echter een tabel voor bv. $p = O(0.01)1$, dan zou men door interpolatie in deze tabel de coëfficiënten kunnen bepalen. Dit kan in het algemeen niet lineair gebeuren. Men doet daarom beter eerst te interpoleren voor $p = 0.33$ en $p = 0.34$, waarvoor men de interpolatiecoëfficiënten dus kent en in de fijnere tabel te interpoleren voor het gevraagde argument.

Men vindt dan :

x	0.6665	0.667
p	.33	.34
f_0	1.53846	1.53846
$p\delta_{\frac{1}{2}}$	- 36264	- 37364
$E_0^{(2)}\delta_0^2$	- 1127	- 1137
$E_1^{(2)}\delta_1^2$	- 718	- 734
$B^{(4)}(\delta_0^4 + \delta_1^4)$	22	22
	<hr/>	<hr/>
	1.500373	1.499247

Het interval is nu 100 maal kleiner geworden. De tweede differenties zullen ongeveer een factor 10^{-4} kleiner worden, dus van de orde 0.2 in de vijfde decimaal. We kunnen dus tussen de twee gevonden waarden lineair interpoleren.

$$f(2/3) = 1.500373 - \frac{1}{3} \times 1126 = 1.499998, \text{ afgerond } 1.50000.$$

9. Terugworp (throwback)

L.J. Comrie heeft een methode aangegeven om de bijdragen van de vierde differenties door een wijziging van de tweede differenties in rekening te brengen.

In de formule van Bessel geven de tweede en vierde differenties de bijdrage

$$B^{(2)}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + B^{(4)}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) \quad (2.9.1)$$

Nu is $B^{(4)} = \frac{1}{12}(p+1)(p-2)B^{(2)}$. De functie $\frac{1}{12}(p+1)(p-2)$ verandert weinig voor $0 \leq p \leq 1$; het maximum is -0.1667 en het minimum is -0.1875 .

Het idee is $B^{(4)}$ te vervangen door $CB^{(2)}$, waarbij C een nader te bepalen constante is. Dan wordt (2.9.1)

$$B^{(2)}(\delta^2 f_0 + C\delta^4 f_0 + \delta^2 f_1 + C\delta^4 f_1).$$

De fout die men hierbij maakt is

$$(B^{(4)} - CB^{(2)})(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1).$$

Men bepaalt C zodanig, dat de extremen van $B^{(4)} - CB^{(2)}$ gelijk zijn in absolute waarden en afwisselend teken hebben. Men vindt $C = -0.184$.

Dan is $|B^{(4)} - CB^{(2)}| \leq 0.00023$. De fout is dus kleiner dan een halve eenheid als $|\delta^4| < 1000$ is.

Wij stellen

$$\begin{aligned} \delta_m^2 f_0 &= \delta^2 f_0 - 0.184 \delta^4 f_0 \\ \delta_m^2 f_1 &= \delta^2 f_1 - 0.184 \delta^4 f_1 \end{aligned} \quad (2.9.2)$$

$\delta_m^2 f_0$ en $\delta_m^2 f_1$ heten gewijzigde tweede differenties.

De formule van Bessel tot en met vierde differenties wordt nu

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + p\delta f_{\frac{1}{2}} + B^{(2)}(\delta_m^2 f_0 + \delta_m^2 f_1) + B^{(3)}\delta^3 f_{\frac{1}{2}}. \quad (2.9.3)$$

Men noemt dit procedé het terugwerpen van de vierde differenties op de tweede differenties. Het mag worden toegepast als $|\delta^4| < 1000$ is.

Men kan op dergelijke wijze ook hogere differenties in rekening brengen, bijv.

$$\delta_m^2 = \delta^2 - 0.184 \delta^4 + 0.038 \delta^6 \quad \text{voor } |\delta^4| < 1000.$$

of meerdere differenties tegelijk wijzigen. Desbetreffende formules vindt men in **Chambers's Tables**.

In de formule van Everett kan men gewijzigde tweede differenties gebruiken als $|\delta^4| < 400$ is. De formule tot en met vierde differenties wordt nu

$$f^*(x_0 + ph) = (1 - p)f_0 + pf_1 + E_0^{(2)} \delta_m^2 f_0 + E_1^{(2)} \delta_m^2 f_1. \quad (2.9.4)$$

Met deze formule interpoleert men, als in een tabel gewijzigde tweede differenties worden gegeven.

Voorbeeld :

De tabel van § 8 voor $\frac{1}{x}$ met gewijzigde differenties wordt :

x	f(x)	δ_m^2
0.60	1.66667	2293
.65	.53846	1808
.70	.42857	1448
.75	.33333	1179

Bereken $f(2/3)$

$$\begin{aligned} (1 - p)f_0 &= 1.025640 \\ pf_1 &= 0.476190 \\ E_0^{(2)} \delta_{m0}^2 &= -1116 \\ E_1^{(2)} \delta_{m1}^2 &= -715 \\ \hline &1.499999 \\ f(2/3) &= 1.50000 \end{aligned}$$

Opmerking : Men kan uit gewijzigde tweede differenties natuurlijk geen hogere differenties berekenen.

10. Inverse interpolatie.

De inverse interpolatie is reeds behandeld in hoofdstuk I, § 7. Wil men gebruik maken van het feit, dat de basispunten equidistant zijn, dan kan men nog anders te werk gaan.

We illustreren dit aan een voorbeeld.

x	sin x	δ	δ^2	δ^3	δ^4	δ^2_m
20°	0.34202	15798	-1039	-480	31	-1045
30°	0.50000		-1519		45	-1527

Gevraagd wordt arc sin 0.4.

De formule van Bessel met gewijzigde differenties is

$$f_p = f_0 + p\delta f_{\frac{1}{2}} + B^{(2)}(p) (\delta_m^2 f_0 + \delta_m^2 f_1) + B^{(3)}(p) \delta^3 f_{\frac{1}{2}}. \quad (2.10.1)$$

Nu is $f_p = 0.4$ bekend, m.a.w. (2.10.1) stelt een vergelijking voor waaruit p moet worden opgelost. Daartoe schrijven we (2.10.1) in de vorm

$$p = \frac{f_p - f_0 - B^{(2)}(p) (\delta_m^2 f_0 + \delta_m^2 f_1) - B^{(3)}(p) \delta^3 f_{\frac{1}{2}}}{\delta f_{\frac{1}{2}}} =$$

$$= 0.36701 + 0.1628 B^{(2)}(p) + 0.0304 B^{(3)}(p) \quad (2.10.2)$$

Een eerste benadering van p volgt uit

$$p = \frac{f_p - f_0}{\delta f_{\frac{1}{2}}} = 0.36701$$

We bepalen de bijbehorende waarden van $B^{(2)}$ en $B^{(3)}$ en substitueren deze in het rechterlid van (2.10.2) Dit geeft een betere benadering van p .

$$p = 0.36701 + (0.1628) \cdot (0.05808) + (0.0304) \cdot (0.0051) =$$

$$= 0.36701 - 0.00946 + 0.00015 = 0.35770.$$

We bepalen nogmaals $B^{(2)}$ en $B^{(3)}$ voor $p = 0.3577$ en substitueren weer in (2.10.2).

$$p = 0.36701 + (0.1628)(-0.05744) + (0.0304)(0.0054) =$$

$$= 0.36701 - 0.00935 + 0.00016 = 0.35782.$$

Men ziet dat de bijdragen van $B^{(2)} (\delta_{m_0}^2 f_0 + \delta_{m_1}^2 f_1)$ en $B^{(3)} \delta^3 f_{\frac{1}{2}}$ maar weinig veranderen. Een volgende iteratie geeft nog slechts een wijziging in de vijfde decimaal. Afgerond op 4 decimalen is dus $p = 0.3578$ en $\text{arc sin } 0.4 = 23,578^\circ$.

Opmerking : De nauwkeurigheid waarmee p kan worden berekend is afhankelijk van het aantal cijfers van δf . In dit geval heeft δf vijf cijfers ; we kunnen daarom p in vier decimalen bepalen.

HOOFDSTUK III. NUMERIEKE INTEGRATIE

1. Inleiding

Wordt de functie $f(x)$ gegeven in de vorm van een tabel, dan zal men voor de berekening van de integraal van $f(x)$ gebruik moeten maken van numerieke methoden. Ook als $f(x)$ analytisch is gegeven, maar de integraal niet langs analytische weg kan worden berekend, zal men deze methoden moeten toepassen.

Men kan twee gevallen onderscheiden, nl.

1) de berekening van integralen met vaste grenzen, d.w.z. $I = \int_a^b f(x)dx$,
a en b constant.

2) de berekening van "lopende" integralen, d.w.z. $I(x) = \int_a^x f(t)dt$,

waarbij $I(x)$ moet worden berekend voor een aantal waarden van de bovengrens x .

De integratieformules worden verkregen door de diverse interpolatieformules van hoofdstuk II te integreren en berusten dus weer op de benadering van $f(x)$ door een polynoom. Lagrange geeft integratieformules uitgedrukt in functiewaarden, terwijl Newton, Stirling en Bessel integratieformules opleveren, uitgedrukt in differenties.

2. Integratieformules met functiewaarden

Om $\int_a^b f(x)dx$ te berekenen verdelen we het interval (a,b) in n gelijke

subintervallen van de lengte $h = \frac{b-a}{n}$ en stellen we $x = x_0 + hp$,
met $x_0 = a$.

We benaderen $f(x)$ door het interpolatiepolynoom door de $n + 1$ basispunten $x_0 = a, x_1, x_2, \dots, x_n = b$.

Volgens Lagrange is

$$f(x) = f(x_0 + ph) = L_0(p) f_0 + L_1(p) f_1 + \dots + L_n(p) f_n + R,$$

dus

$$\frac{1}{h} \int_{x_0}^{x_0+nh} f(x)dx = \int_0^n f(x_0 + ph)dp = f_0 \int_0^n L_0(p)dp + \dots + f_n \int_0^n L_n(p)dp$$

+ restterm.

Men vindt achtereenvolgens voor $n = 1, 2, 3, 4$

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx = \frac{h}{2} (f_0 + f_1) - \frac{h^3}{12} f''(\xi) \quad \text{trapezium-regel.}$$

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} f(x) dx = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + f_2) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi) \quad \text{regel van Simpson.}$$

$$\int_{x_0}^{x_0+3h} f(x) dx = \frac{3h}{8} (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) - \frac{3h^7}{80} f^{(6)}(\xi) \quad \text{drie-achtste regel.}$$

$$\int_{x_0}^{x_0+4h} f(x) dx = \frac{2h}{45} (7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) - \frac{8h^9}{945} f^{(6)}(\xi)$$

Dit zijn de formules van Newton-Cotes van het zgn. gesloten type, omdat de functiewaarden in de eindpunten van het interval in de formules voorkomen.

In de formules van Newton-Cotes van het open type komen de functiewaarden in de eindpunten van het interval niet voor. Men verkrijgt deze, door (a, b) weer in n gelijke subintervallen te verdelen, doch nu het interpolatiepolynoom door de $n - 1$ inwendige basispunten te integreren.

Voor $n = 3, 4$ vindt men

$$\int_{x_0}^{x_0+3h} f(x) dx = \frac{3h}{2} (f_1 + f_2) + \frac{3h^3}{4} f''(\xi)$$

$$\int_{x_0}^{x_0+4h} f(x) dx = \frac{4h}{3} (2f_1 - f_2 + 2f_3) + \frac{14h^5}{45} f^{(4)}(\xi)$$

Deze formules spelen hoofdzakelijk een rol bij de numerieke integratie van differentiaalvergelijkingen.

In bovenstaande formules zijn tevens de resttermen gegeven, die we verder niet zullen afleiden.

De trapezium-regel heeft de restterm $-\frac{h^3}{12} f''(\xi)$. Deze regel is dus exact voor een lineaire functie, zoals op grond van de afleiding ook is te verwachten. Voor vele toepassingen is de trapezium-regel te onnauwkeurig.

Beschouwen we de regel van Simpson, dan is de restterm $-\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$ m.a.w. deze regel is exact voor een polynoom van de derde graad. Dit is meer dan we konden verwachten, omdat bij de afleiding een kwadratisch interpolatiepolynoom is gebruikt. Men ziet dat deze eenvoudige formule reeds een vrij goede nauwkeurigheid geeft, mits h klein genoeg is. De regel van Simpson wordt dan ook veel gebruikt. Hoewel de drie-achtsteregel vier functiewaarden gebruikt is de restterm van dezelfde orde van grootte als die van Simpson. De toepassing van deze formule levert dus geen enkel voordeel op.

Bij integratie over een groot interval (a, b) zou men een Newton-Cotes formule kunnen toepassen voor meer punten. Dit is in het algemeen niet aanbevelenswaardig. Men kan beter het interval (a, b) verdelen in kleine subintervallen en de trapezium-regel of Simpson herhaald toepassen.

Een verdeling van (a, b) in n subintervallen van de lengte h en n -maal toepassen van de trapezium-regel geeft

$$\int_a^b f(x) dx = h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n \right) - \frac{n}{12} h^3 f''(\xi). \quad (3.2.1)$$

Past men de regel van Simpson $\frac{n}{2}$ maal toe, dan komt er

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 4f_{n-3} + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n) - \frac{nh^5}{180} f^{(4)}(\xi) \quad (3.2.2)$$

Deze formule is alleen te gebruiken voor een even aantal intervallen. Moet men integreren over een oneven aantal intervallen, dan kan men bijv. voor het eerste drietal intervallen de drie-achtste regel gebruiken en daarna overgaan op formule (3.2.2).

Voor de berekening van een lopende integraal $\int_a^x f(t)dt$ zal men natuurlijk de bijdrage van elk interval afzonderlijk moeten bepalen.

Bij de regel van Simpson of een andere Newton-Cotes formule geeft het verloop van de berekening geen indruk van de bereikte nauwkeurigheid. Men moet dus op een of andere wijze een schatting van de fout maken. Als van $f(x)$ de vierde afgeleide bekend is, kan men aan de hand van de restterm nagaan of het gebruik van Simpson voor een gegeven intervallengte h geoorloofd is of eventueel vooraf bepalen hoe groot h moet zijn.

Heeft men alleen een tabel, dan kan men de restterm schatten door $-\frac{h}{90} \delta^4$. Hiervoor moet echter eerst een differentietabel worden gemaakt.

Een schatting van de fout kan men ook als volgt verkrijgen. Men berekent de integraal twee maal, de eerste maal voor een onderverdeling van (a,b) in n_1 subintervallen en de tweede maal voor een verdeling in n_2 subintervallen.

Volgens (3.2.2) geldt dan

$$I = I_1 - \frac{(b-a)^5}{180 n_1^4} f^{(4)}(\zeta_1)$$

$$I = I_2 - \frac{(b-a)^5}{180 n_2^4} f^{(4)}(\zeta_2)$$

Als men aanneemt dat $f^{(4)}(x)$ weinig verandert in (a,b) , dan is $f^{(4)}(\zeta_1) \approx f^{(4)}(\zeta_2)$ en eliminatie van de vierde afgeleide geeft

$$I = I_2 + \frac{n_1^4}{n_2^4 - n_1^4} (I_2 - I_1).$$

Neemt men speciaal $n_2 = 2n_1$, dan is dus

$$I = I_2 + \frac{1}{15} (I_2 - I_1).$$

Voorbeeld

Bereken $\int_0^{0.8} \cos x \, dx$ m.b.v. onderstaande tabel en de regel van Simpson.

x	cos x	vermenigvuldiger	
0	1.00000000	1	1
0.1	0.99500417	4	
0.2	0.98006658	2	4
0.3	0.95533649	4	
0.4	0.92106099	2	2
0.5	0.87758256	4	
0.6	0.82533562	2	4
0.7	0.76484219	4	
0.8	0.69670671	1	1

De som $f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \dots$ kan in één machinegang worden berekend.

Het resultaat wordt vermenigvuldigd met $\frac{h}{3}$. We vinden $I_2 = 0.71735649$.

De nauwkeurigheid schatten we op twee manieren :

1) met de restterm

$$R = -\frac{nh^5}{180} f^{(4)}(\xi) = \frac{-8(0.1)^5}{180} \cos \xi \quad \text{met } 0 < \xi < 0.8$$

$$\text{dus } -0.00000044 < R < -0.00000031.$$

2) we berekenen nogmaals de integraal met $h = 0.2$.

Dit geeft $I_1 = 0.71736250$

$$R \approx \frac{1}{15} (I_2 - I_1) = -0.00000040$$

Deze correctie aangebracht op I_2 geeft $I = 0.71735609$.

Directe berekening van $\int_0^{0.8} \cos x \, dx$ met een sinustafel geeft dezelfde waarde.

Men kan uit de Newton-Cotes formules nog tal van andere afleiden.
Als voorbeeld nemen we de 7-punts formule

$$\int_{x_0}^{x_0+6h} f(x) dx = \frac{h}{140} (41f_0 + 216f_1 + 27f_2 + 272f_3 + 27f_4 + 216f_5 + 41f_6) - \frac{9}{1400} h^7 f^{(7)}(\xi_1).$$

Verder heeft men de relatie

$$\frac{h}{140} \delta^6 f_3 = \frac{h}{140} (f_0 - 6f_1 + 15f_2 - 20f_3 + 15f_4 - 6f_5 + f_6)$$

Door beide formules bij elkaar op te tellen vindt men

$$\int_{x_0}^{x_0+6h} f(x) dx = \frac{3h}{10} (f_0 + 5f_1 + f_2 + 6f_3 + f_4 + 5f_5 + f_6) + \frac{h^7}{140} f^{(7)}(\xi_1) - \frac{9h^7}{1400} f^{(7)}(\xi_2).$$

Dit is de regel van Weddle.

Een voordeel van deze formule is natuurlijk dat de coëfficiënten zo eenvoudig zijn. De praktische bruikbaarheid wordt verminderd doordat het aantal intervallen een veelvoud van zes moet zijn.

3. Integratie met behulp van differenties.

Integreert men de formule van Bessel tussen de grenzen x_0 en $x_0 + h$, dan vindt men

$$\begin{aligned} \frac{1}{h} \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx &= \int_0^1 f(x_0 + hp) dp = \int_0^1 (f_0 + p\delta f_{\frac{1}{2}} + B(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \dots) dp \\ &= f_0 + \frac{1}{2}\delta f_{\frac{1}{2}} - \frac{1}{24}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \frac{11}{1440}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \dots = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ (f_0 + f_1) - \frac{1}{12} (\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \frac{11}{720} (\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \right. \\ \left. - \frac{191}{60480} (\delta^6 f_0 + \delta^6 f_1) + \frac{2497}{3628800} (\delta^8 f_0 + \delta^8 f_1) + \dots \right\} \quad (3.3.1)$$

Bij de integratie vallen de oneven differenties weg.

Evenzo kan men de formule van Stirling integreren tussen de grenzen $x_0 - h$ en $x_0 + h$. Hierbij vallen eveneens de differenties van oneven orde weg en men krijgt

$$\frac{1}{h} \int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x) dx = 2(f_0 + \frac{1}{6} \delta^2 f_0 - \frac{1}{180} \delta^4 f_0 + \frac{1}{1512} \delta^6 f_0 + \dots) \quad (3.3.2)$$

Nu is $2(f_0 + \frac{1}{6} \delta^2 f_0) = \frac{1}{3}(f_{-1} + 4f_0 + f_1)$, dus de eerste twee termen geven juist de formule van Simpson. Men ziet tevens dat de correctie ongeveer $-\frac{h}{90} \delta^4 f_0$ is.

Tenslotte kan men uit respectievelijk de voorwaartse en achterwaartse formule van Newton afleiden

$$\frac{1}{h} \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx = f_0 + \frac{1}{2} \Delta f_0 - \frac{1}{12} \Delta^2 f_0 + \frac{1}{24} \Delta^3 f_0 - \frac{19}{720} \Delta^4 f_0 + \\ + \frac{3}{160} \Delta^5 f_0 - \frac{863}{60480} \Delta^6 f_0 + \dots \quad (3.3.3)$$

en

$$\frac{1}{h} \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx = f_1 - \frac{1}{2} \nabla f_1 - \frac{1}{12} \nabla^2 f_1 - \frac{1}{24} \nabla^3 f_1 - \frac{19}{720} \nabla^4 f_1 - \frac{3}{160} \nabla^5 f_1 + \dots \quad (3.3.4)$$

Met behulp van deze formules kan men $\int_a^x f(t) dt$ berekenen voor een aantal waarden van de bovengrens x . De formules (3.3.3) en (3.3.4) zal men alleen gebruiken aan het begin of het eind van een tabel, als er geen centrale differenties beschikbaar zijn.

Men kan natuurlijk dit soort formules ook opstellen voor $\int_{x_0}^{x_0 + \frac{1}{2}h}$,
 $\int_{x_0 - \frac{1}{2}h}^{x_0 + \frac{1}{2}h}$ etc.

Voorbeeld 1

Bereken $F(x) = \int_0^x e^{t^2} dt$ in vijf decimalen voor $x = 0(0.1)0.8$.

We gebruiken formule (3.3.1), die we schrijven in de vorm

$$\delta F_{j+\frac{1}{2}} = \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx = \frac{1}{2} h s_{j+\frac{1}{2}}. \quad (3.3.5)$$

Eerst zijn berekend de sommen

$$s_{j+\frac{1}{2}} = f_j + f_{j+1} - \frac{1}{12} (\delta^2 f_j + \delta^2 f_{j+1}) + \dots \quad (3.3.6)$$

Bijv. voor $s_{3/2}$ heeft men :

$$\begin{aligned} f_1 + f_2 &= 2.05086 \\ - \frac{1}{12} (\delta^2 f_1 + \delta^2 f_2) &= -3609 \\ \frac{11}{720} (\delta^4 f_1 + \delta^4 f_2) &= 42 \\ - \frac{191}{60480} (\delta^6 f_1 + \delta^6 f_2) &= -1 \\ s_{3/2} &= 2.04729 \end{aligned}$$

We zien dat de invloed van de zesde differenties zeer gering is. Volgens is een controle uitgevoerd op dit deel van de berekening door $\delta^2 s_{j+\frac{1}{2}}$ op twee manieren te berekenen nl. 1e rechtstreeks uit de waarden van $s_{j+\frac{1}{2}}$ en 2e met behulp van de formule

x	e^{x^2}	$6^2 f$	$6^4 f$	$6^6 f$	s	$6^2 s$	$\sqrt{6^2 s}$	Σs	$F(x)$	$6^3 F$	$\frac{1}{2} h 6^2 s$
0.0	1.00000	2010	122	12	2.00669	4060	4061	0.00000	0.00000	204	203
0.1	1.01005	2071	128	15	2.04729	4309	4308	2.00669	0.10033	214	214
0.2	1.04081	2260	149	12	2.13098	4831	4831	4.05398	0.20270	242	242
0.3	1.09417	2598	182	25	2.26298	5682	5682	6.18496	0.30925	284	284
0.4	1.17351	3118	240	33	2.45183	6948	6949	8.44794	0.42240	347	347
0.5	1.28403	3878	331	35	2.71010	8784	8783	10.89974	0.54499	440	439
0.6	1.43333	4969	457	79	3.05624	11396	11395	13.60984	0.68049	570	570
0.7	1.63232	6517	662	90	3.51634			16.66608	0.83330		
0.8	1.89648	8727	957	170				20.18242	1.00912		

controlle

controlle

$$\delta^2 s_{j+\frac{1}{2}} = \delta^2 f_j + \delta^2 f_{j+1} - \frac{1}{12} (\delta^4 f_j + \delta^4 f_{j+1}) + \dots$$

Deze betrekking volgt onmiddellijk uit (3.3.6).
Vervolgens zijn de waarden van $s_{j+\frac{1}{2}}$ gesommeerd. Vermenigvuldiging met $\frac{1}{2} h$ levert tenslotte $F(x_j)$.

Dit laatste deel van de berekening kan men ook weer controleren door $\delta^3 F_{j+\frac{1}{2}}$ op twee manieren uit te rekenen nl. 1e rechtstreeks uit de waarden van F_j en 2e door op te merken dat $\delta^3 F_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} h \delta^2 s_{j+\frac{1}{2}}$. Dit volgt uit (3.3.5).

Opm. In de praktijk zal men meestal de gehele berekening controleren door $\int_0^{0.8} e^{x^2} dx$ te berekenen met een van de hieronder gegeven formules. Een eventuele fout wordt hierdoor wel aangetoond, maar niet gelocaliseerd.

Om $\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx$ te berekenen voor vaste grenzen x_0 en x_n kunnen we bijv. n maal (3.3.1) toepassen en de resultaten optellen. We krijgen aldus

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} \left\{ f_i + f_{i+1} - \frac{1}{12} (\delta^2 f_i + \delta^2 f_{i+1}) + \frac{11}{720} (\delta^4 f_i + \delta^4 f_{i+1}) + \dots \right\}.$$

Nu is

$$\delta^{2k} f_0 + \delta^{2k} f_1 + \dots + \delta^{2k} f_{n-1} = \delta^{2k-1} f_{n-\frac{1}{2}} - \delta^{2k-1} f_{-\frac{1}{2}}$$

$$\delta^{2k} f_1 + \delta^{2k} f_2 + \dots + \delta^{2k} f_n = \delta^{2k-1} f_{n+\frac{1}{2}} - \delta^{2k-1} f_{\frac{1}{2}},$$

zodat de formule overgaat in

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n - \frac{1}{12} \left(\frac{\delta f_{n+\frac{1}{2}} + \delta f_{n-\frac{1}{2}}}{2} + \frac{\delta f_{\frac{1}{2}} + \delta f_{-\frac{1}{2}}}{2} \right) + \dots \right)$$

$$= h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n - \frac{1}{12} (\mu \delta^2 f_n - \mu \delta^2 f_0) + \frac{11}{720} (\mu \delta^4 f_n - \mu \delta^4 f_0) - \frac{191}{60480} (\mu \delta^6 f_n - \mu \delta^6 f_0) + \dots \right)$$

Dit is de integratieformule van Gauss, een zeer bruikbare formule. Deze formule bestaat als het ware uit de trapeziumregel, aangevuld met correctietermen. Om deze te kunnen berekenen heeft men centrale differenties nodig in de eindpunten van het integratie interval m.a.w. men moet $f(x)$ ook buiten dit interval kennen. Is dit niet het geval, dan kan men gebruik maken van de formule van Gregory :

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n + \frac{1}{12} (\Delta f_0 - \nabla f_n) + \frac{1}{24} (\Delta^2 f_0 + \nabla^2 f_n) + \frac{19}{720} (\Delta^3 f_0 - \nabla^3 f_n) - \frac{3}{160} (\Delta^4 f_0 + \nabla^4 f_n) + \frac{863}{60480} (\Delta^5 f_0 - \nabla^5 f_n) + \dots \right)$$

Deze formule kan men op soortgelijke wijze als de formule van Gauss afleiden uit (3.3.3) en (3.3.4). We zullen in de volgende paragraaf nog een andere afleiding geven.

Voorbeeld 2.

Bereken $I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ in 7 decimalen.

We gebruiken Gauss met $h = 0.1$.
Dan is

$$10 \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1.00} + \frac{1}{1.01} + \frac{1}{1.04} + \dots + \frac{1}{1.81} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2.00} +$$

$$- \frac{1}{12} (\mu \delta f_n - \mu \delta f_0) + \frac{11}{720} (\mu \delta^3 f_n - \mu \delta^3 f_0) + \dots$$

$$= 7.8498150 + \text{correctietermen.}$$

Nu is $\frac{1}{1+x^2}$ een even functie, dus $\mu \delta f_0 = \mu \delta^3 f_0 = \dots = 0$.

We behoeven dus alleen de bovengrens van de integraal te beschouwen.

x	f(x)	δ	δ^3	δ^5
0.9	0.5524862	-524862	1912	1702
1.0	0.5000000	-475113	-1162	1286
1.1	0.4524887			

$$- \frac{1}{12} \mu \delta f_{10} + \frac{11}{720} \mu \delta^3 f_{10} - \frac{191}{60480} \mu \delta^5 f_{10} = 0.00416656 +$$

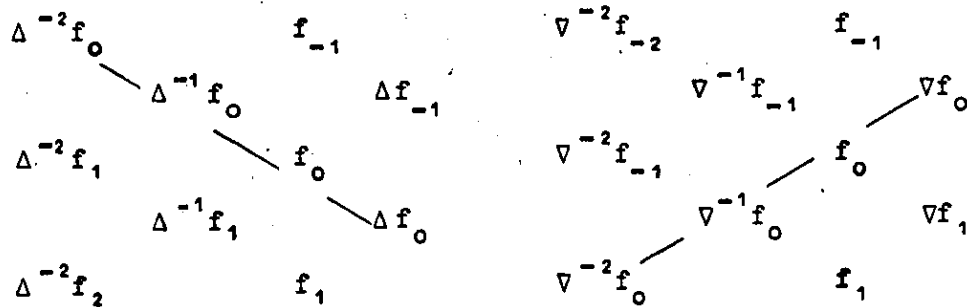
$$+ 0.00000057 - 0.00000047 = 0.0041667.$$

Men vindt $I = \frac{1}{10} (7.8498150 + 0.0041667) = 0.7853982$

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \pi/4 = 0.785398163\dots$$

4. Integratie met somfunctie

De eerste somfunctie van $f(x)$ is een tabel waarvan de eerste differenties gelijk zijn aan de functiewaarden van $f(x)$ in de basispunten. Analoog definieert men de tweede somfunctie etc. In de drie notaties heeft men



$$\begin{array}{ccc}
 \delta^{-2}f_{-1} & & f_{-1} \\
 & \delta^{-1}f_{-\frac{1}{2}} & \delta f_{-\frac{1}{2}} \\
 \delta^{-2}f_0 & \text{---} & f_0 \text{---} \\
 & \delta^{-1}f_{\frac{1}{2}} & \delta f_{\frac{1}{2}} \\
 \delta^{-2}f_1 & & f_1
 \end{array}$$

Merk op dat $\Delta^{-1}f$ slechts op een constante na bepaald is. Zodra men een keuze heeft gemaakt voor b.v. $\Delta^{-1}f_0$, ligt de eerste somfunctie vast. De tweede somfunctie is op een lineaire functie na bepaald.

Wil men van $F(x) = \int_a^x f(t)dt$ een tabel maken, dan geeft formule (3.3.3) de differenties van deze tabel, immers

$$\Delta F_j = \int_{x_j}^{x_j+h} f(t)dt = h(f_j + \frac{1}{2}\Delta f_j - \frac{1}{12}\Delta^2 f_j + \frac{1}{24}\Delta^3 f_j - \dots). \quad (3.4.1)$$

Dit betekent dat $F(x)$ de eerste somfunctie is van het rechterlid van (3.4.1), dus

$$\begin{aligned}
 F_j = \int_a^{x_j} f(t)dt = h(\Delta^{-1}f_j + \frac{1}{2}f_j - \frac{1}{12}\Delta f_j + \frac{1}{24}\Delta^2 f_j - \\
 - \frac{19}{720}\Delta^3 f_j + \frac{3}{160}\Delta^4 f_j - \frac{863}{60480}\Delta^5 f_j + \dots) \quad (3.4.2)
 \end{aligned}$$

Hierin moeten we $\Delta^{-1}f$, die immers op een constante na bepaald is, nog vastleggen. Dit doen we door op te merken dat $\int_a^a f(t) dt = 0$; nemen we dus als x_0 nu de ondergrens a , dan is $\Delta^{-1}f$ bepaald door de eis

$$\Delta^{-1}f_0 = -\frac{1}{2}f_0 + \frac{1}{12}\Delta f_0 - \frac{1}{24}\Delta^2 f_0 + \frac{19}{720}\Delta^3 f_0 - \frac{3}{160}\Delta^4 f_0 + \dots$$

Gaan we uit van formule (3.3.4), dan vinden we op dezelfde manier voor de achterwaartse differenties

$$F_j = \int_a^{x_j} f(t) dt = h(\nabla^{-1}f_j - \frac{1}{2}f_j - \frac{1}{12}\nabla f_j - \frac{1}{24}\nabla^2 f_j - \frac{19}{720}\nabla^3 f_j - \frac{3}{160}\nabla^4 f_j + \dots) \quad (3.4.3)$$

waar $\nabla^{-1}f$ is vastgelegd door

$$\nabla^{-1}f_0 = \frac{1}{2}f_0 + \frac{1}{12}\nabla f_0 + \frac{1}{24}\nabla^2 f_0 + \frac{19}{720}\nabla^3 f_0 + \frac{3}{160}\nabla^4 f_0 + \dots$$

Tenslotte kunnen we de formule voor centrale differenties afleiden uit (3.3.1). Dit geeft

$$F_j = \int_a^{x_j} f(t) dt = h(\mu\delta^{-1}f_j - \frac{1}{12}\mu\delta f_j + \frac{11}{720}\mu\delta^3 f_j - \frac{191}{60480}\mu\delta^5 f_j + \dots) \quad (3.4.4)$$

waarbij $\delta^{-1}f$ wordt bepaald door

$$\mu\delta^{-1}f_0 - \frac{1}{12}\mu\delta f_0 + \frac{11}{720}\mu\delta^3 f_0 - \frac{191}{60480}\mu\delta^5 f_0 + \dots = 0.$$

Verder is $\mu\delta^{-1}f_0 = \frac{1}{2}(\delta^{-1}f_{-\frac{1}{2}} + \delta^{-1}f_{\frac{1}{2}}) = \delta^{-1}f_{-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}f_0$,

dus uiteindelijk

$$\delta^{-1}f_{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}f_0 + \frac{1}{12}\mu\delta f_0 - \frac{11}{720}\mu^3\delta^3 f_0 + \frac{191}{60480}\mu^5\delta^5 f_0 \dots \quad (3.4.5)$$

Voorbeeld

Maak een tabel van $F(x) = \int_{-0.4}^x e^{t^2} dt$ met behulp van formule (3.4.4) voor

$$x = 0.0(0.1)1.0.$$

We zullen alleen $F(0.4)$ en $F(0.5)$ berekenen.

Berekening van $\delta^{-1}f_{-4\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned} -f_{-4} &= -1.17351 \\ \frac{1}{12}(\delta_{-4\frac{1}{2}} + \delta_{-3\frac{1}{2}}) &= -15822 \\ -\frac{11}{720}(\delta_{-4\frac{1}{2}}^3 + \delta_{-3\frac{1}{2}}^3) &= 195 \\ \frac{191}{60480}(\delta_{-4\frac{1}{2}}^5 + \delta_{-3\frac{1}{2}}^5) &= \frac{-5}{-1.189142} \quad \delta_{-4\frac{1}{2}}^{-1} = -0.59457. \end{aligned}$$

Na de opbouw van de somfunctie kan men $F(0.5)$ berekenen.

$$\begin{aligned} \delta^{-1}f_{4\frac{1}{2}} + \delta^{-1}f_{5\frac{1}{2}} &= 19.36905 \\ -\frac{1}{12}(\delta_{4\frac{1}{2}} + \delta_{5\frac{1}{2}}) &= -21652 \\ \frac{11}{720}(\delta_{4\frac{1}{2}}^3 + \delta_{5\frac{1}{2}}^3) &= 283 \\ \frac{-191}{60480}(\delta_{4\frac{1}{2}}^5 + \delta_{5\frac{1}{2}}^5) &= \frac{-7}{19.34767} \end{aligned}$$

$$F(0.5) = \frac{0.1}{2} \times 19.34767 = 0.96738.$$

Evenzo vindt men $F(0.4) = 0.84479$

x	$\delta^{-1}f$	f(x)	δ	δ^2	δ^3	δ^4	δ^5
-0.7		1.63232					
			-19899				
-0.6		1.43333		4969			
			-14930		-1091		
-0.5		1.28403		3878		331	
	-0.59457		<u>-11052</u>		<u>-760</u>		<u>-91</u>
-0.4		1.17351		3118		240	
	0.57894		<u>-7934</u>		<u>-520</u>		<u>-58</u>
-0.3		1.09417		2598		182	
	1.67311		-5336		-338		
-0.2		1.04081		2260			
	2.71392		-3076				
-0.1		1.01005					
	3.72397						
0.0		1.00000					
	4.72397						
0.1		1.01005					
	5.73402		3076				
0.2		1.04081		2260			
	6.77483		5336		338		
0.3		1.09417		2598		182	
	7.86900		<u>7934</u>		<u>520</u>		<u>58</u>
0.4		1.17351		3118		240	
	9.04251		<u>11052</u>		<u>760</u>		<u>91</u>
0.5		1.28403		3878		331	
	10.32654		<u>14930</u>		<u>1091</u>		<u>126</u>
0.6		1.43333		4969		457	
			19899		1548		
0.7		1.63232		6517			
			26416				
0.8		1.89648					

Tot slot bewijzen we nog de formule van Gregory.

$$\begin{aligned} \frac{1}{h} \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= \frac{1}{h} \int_a^{x_n} f(x) dx - \frac{1}{h} \int_a^{x_0} f(x) dx = \nabla^{-1} f_n - \frac{1}{2} f_n - \frac{1}{12} \nabla f_n - \frac{1}{24} \nabla^2 f_n - \\ &- \frac{19}{720} \nabla^3 f_n - (\Delta^{-1} f_0 + \frac{1}{2} f_0 - \frac{1}{12} \Delta f_0 + \frac{1}{24} \Delta^2 f_0 - \frac{19}{720} \Delta^3 f_0 + \dots) \quad (3.4.6) \end{aligned}$$

volgens formules (3.4.2) en (3.4.3).

$$\text{Nu is } \nabla^{-1} f_n - \nabla^{-1} f_0 = f_1 + f_2 + \dots + f_n$$

$$\text{en } \nabla^{-1} f_0 = \Delta^{-1} f_0 + f_0$$

$$\text{dus } \nabla^{-1} f_n = f_0 + f_1 + \dots + f_n + \Delta^{-1} f_0.$$

Hiermede gaat (3.4.6) over in

$$\begin{aligned} \frac{1}{h} \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= \frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n - \frac{1}{12} (\nabla f_n - \Delta f_0) - \\ &- \frac{1}{24} (\nabla^2 f_n + \Delta^2 f_0) - \frac{19}{720} (\nabla^3 f_n - \Delta^3 f_0) - \dots \end{aligned}$$

5. Gauss-integratie

Alle tot nu toe behandelde integratieformules zijn gebaseerd op equidistante argumenten. Gauss heeft laten zien, dat men, door de basispunten niet equidistant te kiezen, met een gelijk aantal gebruikte functiewaarden een hogere nauwkeurigheid kan bereiken. We geven slechts een korte schets van deze methode.

Zij te berekenen $\int_a^b f(x)dx$. We transformeren het interval (a,b) op $(-1,1)$ door de substitutie

$$x = \frac{1}{2}(b+a) + \frac{1}{2}(b-a)t.$$

Dan is $\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{2}(b-a) \int_{-1}^1 \varphi(t)dt$, met $\varphi(t) = f(\frac{1}{2}(b+a) + \frac{1}{2}(b-a)t)$

met $\varphi(t) = f(\frac{1}{2}(b+a) + \frac{1}{2}(b-a)t)$.

We zoeken een integratieformule van de vorm

$$\int_{-1}^1 f(t)dt = \sum_{k=1}^n w_k f(t_k). \quad (3.5.1)$$

Vergelijk dit met de vorm van de Newton-Cotes formules. In het rechterlid van (3.5.1) treden nog $2n$ onbekenden op, nl. de n gewichten w_k en de n basispunten t_k . We kunnen eisen dat (3.5.1) exact is voor alle polynomen van de graad $\leq 2n - 1$. Dan moet de formule dus in het bijzonder exact zijn voor $f(t) = 1$, $f(t) = t$, $f(t) = t^2, \dots, f(t) = t^{2n-1}$. Dit geeft $2n$ vergelijkingen. Omdat we $2n$ onbekenden tot onze beschikking hebben, mogen we verwachten dat we hieraan kunnen voldoen. De vergelijkingen worden

$$\int_{-1}^1 dt = 2 = w_1 + w_2 + \dots + w_n$$

$$\int_{-1}^1 t dt = 0 = w_1 t_1 + w_2 t_2 + \dots + w_n t_n$$

$$\int_{-1}^1 t^2 dt = \frac{2}{3} = w_1 t_1^2 + w_2 t_2^2 + \dots + w_n t_n^2$$

.....

$$\int_{-1}^1 t^{2n-1} dt = 0 = w_1 t_1^{2n-1} + w_2 t_2^{2n-1} + \dots + w_n t_n^{2n-1}$$

Dit is een niet-lineair stelsel vergelijkingen. Door middel van een kunstgreep kan men dit stelsel oplossen. We lichten dit toe voor $n = 3$. Het stelsel wordt dan

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 + w_3 &= 2 \\ w_1 t_1 + w_2 t_2 + w_3 t_3 &= 0 \\ w_1 t_1^2 + w_2 t_2^2 + w_3 t_3^2 &= \frac{2}{3} \\ w_1 t_1^3 + w_2 t_2^3 + w_3 t_3^3 &= 0 \\ w_1 t_1^4 + w_2 t_2^4 + w_3 t_3^4 &= \frac{2}{5} \\ w_1 t_1^5 + w_2 t_2^5 + w_3 t_3^5 &= 0 \end{aligned} \tag{3.5.2}$$

Men kan de t_k opvatten als wortels van de vergelijking

$$t^3 + \alpha_1 t^2 + \alpha_2 t + \alpha_3 = 0,$$

waarvan de coëfficiënten α_1 , α_2 en α_3 nog te bepalen zijn. We vermenigvuldigen de eerste vergelijking van (3.5.2) met α_3 , de tweede met α_2 , de derde met α_1 en de vierde met 1 en tellen op. Dit geeft

$$2\alpha_3 + 0 \cdot \alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_1 + 0 \cdot 1 = 0.$$

We herhalen dit voor de 2de t/m de 5e vergelijking en tenslotte voor de 3e t/m 6e vergelijking. Dit levert

$$0 \cdot \alpha_3 + \frac{2}{3}\alpha_2 + 0 \cdot \alpha_1 + \frac{2}{5} \cdot 1 = 0$$

en $\frac{2}{3}\alpha_3 + 0 \cdot \alpha_2 + \frac{2}{5}\alpha_1 + 0 \cdot 1 = 0.$

Uit deze drie lineaire vergelijkingen kan men α_1 , α_2 en α_3 oplossen ;
 $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = -3/5$ en $\alpha_3 = 0$.
 Men kan nu de t_k berekenen uit $t^3 - \frac{3}{5}t = 0$; $t_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$, $t_2 = 0$ en
 $t_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$.

Tenslotte kan men w_1 , w_2 en w_3 bepalen uit het lineaire stelsel

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 + w_3 &= 2 \\ -\sqrt{\frac{3}{5}} w_1 + 0 \cdot w_2 + \sqrt{\frac{3}{5}} w_3 &= 0 \\ \frac{3}{5} w_1 + 0 \cdot w_2 + \frac{3}{5} w_3 &= \frac{2}{3} \end{aligned}$$

Men vindt $w_1 = 5/9$, $w_2 = 8/9$ en $w_3 = 5/9$.

We hebben dus de volgende 3-punts formule

$$\int_{-1}^1 f(t) dt = \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right).$$

Deze formule is exact voor een polynoom van de vijfde graad. De regel van Simpson gebruikt eveneens 3 functiewaarden, doch is slechts exact voor een polynoom van de derde graad.

Voor $n = 2$ heeft men

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

exact voor een veelterm van de derde graad.

Uit het oogpunt van nauwkeurigheid zijn deze formules dus zeer aantrekkelijk. Een praktisch bezwaar is, dat men om de vereiste functiewaarden te bepalen meestal moet interpoleren.

De basispunten t_k zijn de nulpunten van de zgn. Legendre polynomen

en liggen alle tussen -1 en $+1$.

Men kan uitgaande van (3.5.1) nog andere eisen stellen, bijv. kunnen enkele of alle t_k worden gegeven, waarna men de bijbehorende gewichten w_k kan berekenen. Ook kan men de gewichten voorschrijven en de bijbehorende basispunten bepalen. Eist men bijv. dat alle gewichten gelijk zijn, dan vindt men de integratieformules van Tchebycheff.

Opmerking

Alle in dit hoofdstuk behandelde integratiemethoden berusten op de benadering van de integrand $f(x)$ door een polynoom. De formules zijn dus niet zonder meer bruikbaar als $f(x)$ in het integratieinterval een singulariteit heeft d.w.z. als $f(x)$ of een van zijn afgeleiden oneindig wordt.

Voorbeelden zijn integralen van de vorm $\int_0^a \log x g(x) dx$ en $\int_0^a x^\alpha g(x) dx$ ($-1 < \alpha < 1$), waarbij $g(x)$ een "nette" functie is.

Soms kan men op eenvoudige wijze een dergelijke singulariteit ver-

wijderen. Zo heeft de integraal $I = \int_0^1 e^x \sqrt{x} dx$ een singulariteit

bij $x = 0$. Men kan deze geheel elimineren door te stellen $x = t^2$.

Men heeft dan $I = 2 \int_0^1 e^{t^2} t^2 dt$.

De logarithmische singulariteit in $\int_0^x \frac{\log t}{1+t^2} dt$ kan men verwijderen door partiële integratie :

$$\int_0^x \frac{\log t}{1+t^2} dt = \arctan x \log x - \int_0^x \frac{\arctan t}{t} dt.$$

HOOFDSTUK IV. NUMERIEKE DIFFERENTIATIE

Uit de interpolatieformules kan men door differentiëren formules afleiden voor de numerieke differentiatie. Men moet hierbij nog bedenken dat

$$\frac{d^n f(x)}{dx^n} = \frac{1}{h^n} \frac{d^n f(x_0 + ph)}{dp^n}.$$

Uitgaande van de formule van Bessel vindt men bijv.

$$\begin{aligned} hf'(x) &= \delta f_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}(p - \frac{1}{2})(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \frac{1}{2}(p^2 - p + \frac{1}{6})\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{1}{12}(p^3 - \frac{3}{2}p^2 - \frac{1}{2}p + \frac{1}{2})(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \dots \end{aligned}$$

$$h^2 f''(x) = \frac{1}{2}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + (p - \frac{1}{2})\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \dots$$

Speciaal van belang zijn de afgeleiden in de basispunten ($p = 0$) en halverwege ($p = \frac{1}{2}$).

Voor $p = \frac{1}{2}$ heeft men

$$hf'_{\frac{1}{2}} = \delta f_{\frac{1}{2}} - \frac{1}{24} \delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \frac{3}{640} \delta^5 f_{\frac{1}{2}}$$

$$h^2 f''_{\frac{1}{2}} = \mu \delta^2 f_{\frac{1}{2}} - \frac{5}{24} \mu \delta^4 f_{\frac{1}{2}} + \frac{259}{5760} \mu \delta^6 f_{\frac{1}{2}} + \dots$$

De formules voor $p = 0$ leidt men op dezelfde manier af met Stirling. Men vindt aldus de volgende formules :

$$hf'_0 = \mu \delta f_0 - \frac{1}{6} \mu \delta^3 f_0 + \frac{1}{30} \mu \delta^5 f_0 + \dots$$

$$h^2 f''_0 = \delta^2 f_0 - \frac{1}{12} \delta^4 f_0 + \frac{1}{90} \delta^6 f_0 + \dots$$

$$h^3 f'''_0 = \mu \delta^3 f_0 - \frac{1}{4} \mu \delta^5 f_0 + \frac{7}{120} \mu \delta^7 f_0 + \dots$$

$$hf'_{\frac{1}{2}} = \delta f_{\frac{1}{2}} - \frac{1}{24} \delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \frac{3}{640} \delta^5 f_{\frac{1}{2}} + \dots$$

$$h^2 f''_{\frac{1}{2}} = \mu \delta^2 f_{\frac{1}{2}} - \frac{5}{24} \mu \delta^4 f_{\frac{1}{2}} + \frac{259}{5760} \mu \delta^6 f_{\frac{1}{2}} + \dots$$

$$h^3 f'''_{\frac{1}{2}} = \delta^3 f_{\frac{1}{2}} - \frac{1}{8} \delta^5 f_{\frac{1}{2}} + \frac{37}{1920} \delta^7 f_{\frac{1}{2}} + \dots$$

In voorwaartse en achterwaartse differenties heeft men

$$hf'_0 = \Delta f_0 - \frac{1}{2} \Delta^2 f_0 + \frac{1}{3} \Delta^3 f_0 - \frac{1}{4} \Delta^4 f_0 + \frac{1}{5} \Delta^5 f_0 + \dots$$

$$h^2 f''_0 = \Delta^2 f_0 - \Delta^3 f_0 + \frac{11}{12} \Delta^4 f_0 - \frac{5}{6} \Delta^5 f_0 + \frac{137}{180} \Delta^6 f_0 + \dots$$

$$hf'_0 = \nabla f_0 + \frac{1}{2} \nabla^2 f_0 + \frac{1}{3} \nabla^3 f_0 + \frac{1}{4} \nabla^4 f_0 + \frac{1}{5} \nabla^5 f_0 + \dots$$

$$h^2 f''_0 = \nabla^2 f_0 + \nabla^3 f_0 + \frac{11}{12} \nabla^4 f_0 + \frac{5}{6} \nabla^5 f_0 + \frac{137}{180} \nabla^6 f_0 + \dots$$

Men ziet dat de centrale formules sneller convergeren dan de voorwaartse of achterwaartse, terwijl de formules met echte centrale differenties weer beter convergeren, dan die met gemiddelde differenties.

Bij het gebruik van deze formules dient men het volgende in het oog te houden. De invloed van afrondingsfouten in de functiewaarden wordt bij hogere differenties steeds groter. Hogere afgeleiden kunnen dus slechts met beperkte nauwkeurigheid worden bepaald. Terwijl dus bij de numerieke integratie de afrondingsfouten min of meer worden ver-effend, worden ze hier juist geaccentueerd.

Bovendien komt hier nog een moeilijkheid bij. Men mag het interval h niet te klein nemen, immers dan worden de differenties ook klein. Bij het berekenen van deze differenties heeft men dus verlies van significante cijfers. Anderzijds mag h ook niet te groot zijn, want dan convergeren de differentiatieformules niet meer. Men moet dus trachten een compromis te vinden.

Al met al is het beter de numerieke differentiatie zo mogelijk te vermijden.

Voorbeeld

Gegeven is een tabel in 6 decimalen van $f(x) = \sin x$ met $h = \pi/90$ (2°). Bereken $f'(45^\circ) = \cos 45^\circ = 0.707107$ uit de tabel.

x	$\sin x$	δ	δ^2	δ^3
44°	0.694658		-845	
		24682		-32
46°	0.719340		-877	

Nu is $p = \frac{1}{2}$, dus

$$f'(45^\circ) = \frac{90}{\pi} (24682 + \frac{1}{24} \cdot 32) = 0.70709 + 0.00004 = 0.70713.$$

Er treedt cijferverlies op, omdat het interval te klein is.

Gebruiken we een tabel met $h = \frac{\pi}{18}$ (10°), dan heeft men

x	$\sin x$	δ	δ^2	δ^3
40°	0.642788			108
		123256	-3743	
50°	0.766044			

$$\begin{aligned}
 f'(45^\circ) &= \frac{18}{\pi} \left(123256 + \frac{1}{24} \cdot 3743 + \frac{3}{640} \cdot 108 \right) = \\
 &= 0.706205 + 0.000894 + 0.000003 = 0.707102.
 \end{aligned}$$

Nemen we een tabel met $h = \pi/2$ (90°), dan vindt men

$$\begin{aligned}
 f'(45^\circ) &= \frac{2}{\pi} \left(1 + \frac{1}{24} \cdot 2 + \frac{3}{640} \cdot 4 \right) = \\
 &= 0.6366 + 0.0531 + 0.0119 = 0.7016.
 \end{aligned}$$

De convergentie is nu slecht.

HOOFDSTUK V. DIFFERENTIAALVERGELIJKINGEN

1. Inleiding

Zoals bekend, is een differentiaalvergelijking een vergelijking, waarin behalve de grootheden x en y ook de afgeleiden y' , $y'' \dots y^{(n)}$ voorkomen, dus :

$$F(y^{(n)}, y^{(n-1)} \dots y', y, x) = 0. \quad (5.1.1)$$

De vraag is dan : welke functies $y = y(x)$ voldoen hieraan ?

Reeds enkele typen zijn vroeger behandeld, nl. scheiding van variabelen, lineaire d.v. met constante coëfficiënten.

We beschouwen nu als bijzonder geval van (5.1.1) de differentiaalvergelijking

$$\varphi(y', y, x) = 0$$

en denken ons deze naar y' opgelost :

$$y' = f(x, y). \quad (5.1.2)$$

Daar y' de tangens van de hoek voorstelt, die de raaklijn in het punt (x, y) maakt met de positieve X -as, kan men zeggen, dat (5.1.2) een richtingsveld bepaalt : aan elk punt (x, y) is een richting toegevoegd. Als het richtingsveld aan bepaalde eisen voldoet, die we hier niet zullen behandelen, gaat door elk punt (x_0, y_0) slechts één kromme, een zgn. integraalkromme.

Hebben we de algemene oplossing gevonden in de gedaante $\phi(x, y, C) = 0$, dan kunnen we, als we de integraalkromme door (x_0, y_0) wensen, C vinden uit $\phi(x_0, y_0, C) = 0$.

Voorbeeld :

Zij gegeven $y = Cx^2$, C constant, willekeurig.

Dit stelt een stelsel parabolen voor.

Differentiëren geeft : $y' = 2Cx$, waaruit na eliminatie van C volgt :

$$y' = 2 \frac{y}{x}. \quad (5.1.3)$$

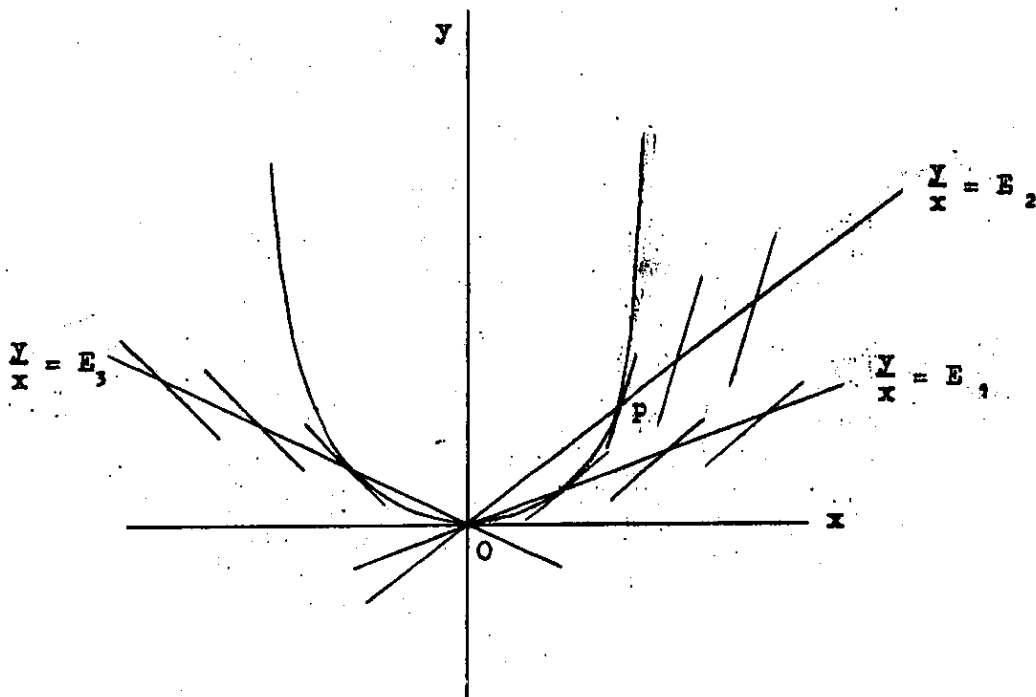
Deze d.v. is door scheiding van variabelen direct op te lossen, immers uit (5.1.3) volgt

$$\frac{y'}{y} = \frac{2}{x} \implies \log |y| = 2 \log |x| + D \implies |y| = e^D x^2 = Ax^2 ;$$

$$A > 0, \text{ dus } y = Cx^2 \text{ met } C = \pm A. \quad (5.1.4)$$

We kunnen de d.v. (5.1.3) ook oplossen met behulp van zgn. isoklinen (lijnen van gelijke helling). Deze zijn nuttig om een inzicht te krijgen in de gedaante der oplossing. We gaan uit van (5.1.3) en stellen $\frac{y}{x} = E$ (E constant).

Dit is een rechte door O. Wegens (5.1.3) is in elk punt van deze rechte $y' = 2E$.



Aan elk punt van $y = Ex$ is een richting $2E$ toegevoegd. Het richtingsveld is nu bekend, dus kunnen we nu door elk punt P van het vlak een integraalkromme tekenen. In dit geval is er slechts één.

Is $P \equiv (1,1)$, dan volgt uit (5.1.4) : $C = 1$.

2. Exacte differentiaalvergelijkingen

We gaan uit van $F(x,y) = C$. (5.2.1)
 Door differentiatie naar x volgt er

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} y' = 0. \quad (5.2.2)$$

We kunnen nu zeggen : (5.2.1) voldoet aan de d.v. (5.2.2).
 (5.2.2) is van het type

$$P(x,y) + Q(x,y) y' = 0. \quad (5.2.3)$$

Wegens $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 F}{\partial y \partial x}$ (we nemen aan, dat dit geldt) is nu

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x} \quad (5.2.4)$$

Een d.v. van het type (5.2.3), die aan (5.2.4) voldoet, heet exact.
 Omgekeerd zullen we nu een oplossing van de gedaante (5.2.1) trachten te vinden, uitgaande van (5.2.3).

Voorbeeld :

Los op : $x^2 + y^2 + 2xyy' = 0$.

Oplossing : De d.v. is inderdaad exact, want

$$\frac{\partial P}{\partial y} = 2y \quad \text{en} \quad \frac{\partial Q}{\partial x} = 2y.$$

We zien dus, als $F(x,y) = C$ een oplossing moet zijn, dat $\frac{\partial F}{\partial x} = x^2 + y^2$,
 waaruit volgt $F = \frac{1}{3} x^3 + xy^2 + \Phi(y)$.

We trachten nu $\Phi(y)$ zo te vinden, dat $\frac{\partial F}{\partial y} = 2xy$.

Nu is $\frac{\partial F}{\partial y} = 2xy + \Phi'(y)$, dus $\Phi'(y) = 0$; $\Phi(y) = C_1$.

De algemene oplossing is dus

$$\frac{1}{3} x^3 + xy^2 + C_1 = C \quad \text{of} \quad \frac{1}{3} x^3 + xy^2 = D.$$

Het komt vaak voor, dat bij gegeven

$$P(x,y) + Q(x,y) y' = 0 \quad \text{niet geldt, dat} \quad \frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial y}.$$

De d.v. is dan niet exact. Toch gelukt het soms om de gegeven vergelijking exact te maken, door vermenigvuldiging van het linkerlid met een zgn. integrerende factor $\mu(x,y) \neq 0$. De d.v. wordt dan

$$\mu P + \mu Q y' = 0, \quad (5.2.5)$$

die nu wel exact is.

Dan moet $\frac{\partial(\mu P)}{\partial y} = \frac{\partial(\mu Q)}{\partial x}$ zijn, of

$$P \frac{\partial \mu}{\partial y} - Q \frac{\partial \mu}{\partial x} = \left(\frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y} \right) \mu. \quad (5.2.6)$$

We moeten nu μ trachten te vinden, zodat hieraan voldaan is. Dit leidt echter tot het oplossen van een partiële differentiaalvergelijking, wat in het algemeen beduidend moeilijker is dan het oplossen van een gewone d.v., als waarvan we zijn uitgegaan.

Met enige handigheid is echter vaak te zien, dat μ bv. alleen van x , van y , van xy , van $x + y$ of iets dergelijks afhangt. Het is nl. voldoende dat we één μ vinden, die aan (5.2.6) voldoet.

Voorbeeld :

$$\text{Los op} \quad (x^2 + y^2 + 2x) + 2yy' = 0.$$

Oplossing : De gegeven d.v. is niet exact, dus we voeren een integrerende factor μ in.

(5.2.6) geeft

$$2y \frac{\partial \mu}{\partial x} - (x^2 + y^2 + 2x) \frac{\partial \mu}{\partial y} = 2\mu y.$$

Kies voor μ een functie, die alleen van x afhangt, dan blijft slechts over

$$\frac{d\mu}{dx} = \mu ; \text{ een oplossing is : } \mu = e^x.$$

De gegeven vergelijking wordt nu

$$e^x(x^2 + y^2 + 2x) + 2e^x yy' = 0,$$

dus
$$F = \int (x^2 + y^2 + 2x) e^x dx + \varphi(y) = (x^2 + y^2) e^x + \varphi(y).$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = 2ye^x + \varphi'(y) = 2ye^x \implies \varphi'(y) = 0 \implies \varphi(y) = C_1.$$

De algemene oplossing is dus $(x^2 + y^2) e^x = D$. ($D \neq 0$)

Opmerking : De gegeven d.v. kan veel sneller worden opgelost. Ze is nl. te schrijven als

$$(x^2 + y^2 + 2x) dx + 2y dy = 0 \quad \text{of}$$

$$(x^2 + y^2) dx + d(x^2 + y^2) = 0$$

$$dx + \frac{d(x^2 + y^2)}{x^2 + y^2} = 0.$$

Integreren geeft : $x + \log(x^2 + y^2) = C$ of $(x^2 + y^2) e^x = D$. ($D \neq 0$)

3. Lineaire differentiaalvergelijkingen van de eerste orde

Gedaante : $y' + P(x)y = Q(x)$. (5.3.1)

$P(x)$ en $Q(x)$ zijn willekeurige functies van x .

We passen, om deze d.v. op te lossen een tweetal kunstgrepen toe.

Eerst stellen we $y = v(x) \cdot u(x)$, er volgt dan :

$$\begin{aligned} u'v + uv' + Puv &= Q \\ u(v' + Pv) + u'v &= Q \end{aligned} \quad (5.3.2)$$

Kies nu één $v(x)$ zò, dat $v' + Pv = 0$ (5.3.3)

dus $\frac{dv}{v} = -P(x)dx$ of $v(x) = Ce^{-\int P(x)dx}$ en neem $C = 1$.

Dan is $v(x) = e^{-\int P(x)dx}$.

Daar $v(x)$ slechts aan (5.3.3) behoeft te voldoen, nemen we de eenvoudigste functie $v(x) \neq 0$, die daaraan voldoet.

We krijgen nu wegens (5.3.2)

$$\frac{du}{dx} = \frac{Q(x)}{v(x)} = \varphi(x),$$

waaruit u direct door integratie volgt.

Daarmee is $y(x) = u(x) \cdot v(x)$ gevonden als oplossing van (5.3.1).

Voorbeelden

1) Los op : $y' + \frac{y}{x \log x} = \frac{1}{x}$.

Oplossing : Stel $y = uv$, dan volgt er

$$u'v + uv' + \frac{uv}{x \log x} = \frac{1}{x} \quad \text{of} \quad u(v' + \frac{v}{x \log x}) + u'v = \frac{1}{x}.$$

Stel $v' + \frac{v}{x \log x} = 0$, dan komt er : $\frac{dv}{v} = -\frac{dx}{x \log x}$, dus

$$\log v = -\log \log x + C.$$

Neem $C = 0 \implies v = \frac{1}{\log x}$.

Substitutie van v geeft :

$$u' = \frac{\log x}{x}, \quad \text{dus} \quad u = \frac{1}{2} \log^2 x + C.$$

De algemene oplossing is dus $y = uv = \frac{1}{2} \log x + \frac{C}{\log x}$.

$$2) \text{ Los op : } y' + \frac{2x}{1-x^2} y = \frac{1}{1+x^2} .$$

Oplossing : Stel $y = uv$; er volgt

$$u(v' + \frac{2x}{1-x^2} v) + u'v = \frac{1}{1+x^2} .$$

$$\text{Stel } v' + \frac{2x}{1-x^2} v = 0 \implies v = x^2 - 1 , \text{ dus}$$

$$u' = \frac{1}{1+x^2} \frac{1}{x^2-1} = (\text{breuksplitsing}) =$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{1}{1+x^2} + \frac{1}{4} \frac{1}{x-1} - \frac{1}{4} \frac{1}{x+1}$$

$$\text{dus } u = -\frac{1}{2} \arctan x + \frac{1}{4} \log \left| \frac{x-1}{x+1} \right| + C$$

$$\text{w.u.v. } y = (x^2 - 1) \left(-\frac{1}{2} \arctan x + \frac{1}{4} \log \left| \frac{x-1}{x+1} \right| + C \right) .$$

Opmerking : De standaardmethode is niet altijd de snelste, zoals het volgende voorbeeld laat zien.

$$\text{Los op : } (x - x^2)y' + (1 - 2x)y = e^x .$$

Oplossing : Nadere beschouwing van het linkerlid leert, dat dit geschreven kan worden als

$$\frac{d}{dx} (x - x^2) y .$$

$$\text{Er volgt dus } (x - x^2) y = e^x + C .$$

4. Homogene differentiaalvergelijkingen van de eerste orde

Gedaante : $y' = f\left(\frac{y}{x}\right)$.

Ze worden opgelost door te stellen $z = \frac{y}{x}$.

We geven ter illustratie een voorbeeld :

$$(x^2 - y^2) dx + 2xy dy = 0 \text{ op te lossen.}$$

Oplossing : $y' = -\frac{x^2 - y^2}{2xy}$, $xy \neq 0$.

Deze d.v. is inderdaad van de gestelde gedaante, immers het rechterlid is te schrijven als : $-\frac{1}{2}\frac{x}{y} + \frac{1}{2}\frac{y}{x}$ en dit is een functie van $\frac{y}{x}$.

We stellen nu $z = \frac{y}{x}$, en er volgt :

$$y' = xz' + z, \text{ dus } xz' + z = \frac{1}{2}z - \frac{1}{2z}; \quad xz' = -\frac{z^2 + 1}{2z}; \text{ dus}$$

$$\frac{2zz'}{z^2 + 1} = -\frac{1}{x} \text{ of } (z^2 + 1)x = C, \text{ w.u.v. } (x^2 + y^2) = Cx$$

met $C \neq 0$.

Een type, dat direct tot een homogene d.v. te herleiden is, is

$$y' = f\left(\frac{ax + by + c}{dx + ey + g}\right),$$

waarbij a, b, c, d, e en g constanten zijn.
We stellen hierbij

$$\left. \begin{aligned} x &= X + p \\ y &= Y + q \end{aligned} \right\} \text{ tenzij } \frac{a}{d} = \frac{b}{e} \neq \frac{c}{g}$$

waarbij p en q geschikt gekozen worden.

In geval dat $\frac{a}{d} = \frac{b}{e} \neq \frac{c}{g}$ stelt men $z = ax + by$.

Voorbeeld :

$$\text{Los op } y' = \frac{x - y - 4}{x + y - 2}.$$

Oplossing : Stel $x = X + p$; $y = Y + q$, dan volgt

$$\frac{dY}{dX} = \frac{X + p - Y - q - 4}{X + p + Y + q - 2}.$$

$$\text{Kies nu } \begin{cases} p - q - 4 = 0 \\ p + q - 2 = 0 \end{cases} \implies p = 3 ; q = -1.$$

$$\text{De d.v. wordt dan } \frac{dY}{dX} = \frac{X - Y}{X + Y}$$

wat een homogene d.v. is.

5. Oplossen van differentiaalvergelijkingen met behulp van machtreeksen

Om de gang van zaken aan te geven, beginnen we met een voorbeeld.

$$\text{Los op } y' - x^2 y = 0 \tag{5.5.1}$$

De algemene oplossing is direct te vinden door scheiding van variabelen,

$$\text{nl. } y = Ae^{\frac{1}{3}x^3}.$$

We substitueren voor y de machtreeks $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots$,

kort geschreven : $y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$, waarbij we a_n zo trachten te bepalen, dat aan (5.5.1) is voldaan.

$$\text{Nu is } y' = a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \dots \quad \text{of } y' = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n x^{n-1}.$$

Substitueren in (5.5.1) geeft

$$(a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \dots) - (a_0 x^2 + a_1 x^3 + \dots) = 0.$$

Dit moet gelden voor iedere x en we stellen dus de coëfficiënten van x^n voor $n = 0, 1, 2, \dots$ gelijk aan 0.

Er volgt dan :

$$\begin{aligned} a_1 &= 0 \\ a_2 &= 0 \\ 3a_3 - a_0 &= 0 \\ 4a_4 - a_1 &= 0 \\ &\vdots \\ na_n - a_{n-3} &= 0 \end{aligned}$$

dus : $0 = a_1 = a_4 = a_7 = \dots$
 en $0 = a_2 = a_5 = a_8 = \dots$,

terwijl slechts die indices, die 3-vouden zijn, $\neq 0$ zijn, daar we $a_0 \neq 0$ stellen.

Dus

$$a_{3k} = \frac{a_{3k-3}}{3k} = \frac{a_{3(k-2)}}{3k \cdot 3(k-1)} = \dots = \frac{a_0}{3k \cdot 3(k-1) \dots 3 \cdot 1} = \frac{a_0}{3^k k!}.$$

Als oplossing vinden we dus :

$$y = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_0}{3^k \cdot k!} x^{3k} = a_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{x^3}{3}\right)^k = a_0 e^{\frac{x^3}{3}}.$$

De hierboven geschetste methode gelukt altijd bij een lineaire d.v., waarvan de coëfficiënten en het rechterlid in een machtreeks te ontwikkelen zijn en de coëfficiënt der hoogste afgeleide 1-is. Het bewijs van deze bewering voeren we niet uit.

Een iets uitgebreider voorbeeld dan het vorige is het onderstaande :

$$y''' - x^2 y'' + 2xy' - 2y = 0 \quad \text{op te lossen.}$$

We stellen weer $y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$

Substitutie levert

$$\sum_{n=3}^{\infty} n(n-1)(n-2)a_n x^{n-3} - \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n x^n +$$

$$+ 2 \sum_{n=1}^{\infty} n a_n x^n - 2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0.$$

Uitschrijven van elke reeks geeft

$$\begin{aligned} & 3 \cdot 2 \cdot 1 a_3 + 4 \cdot 3 \cdot 2 a_4 x + 5 \cdot 4 \cdot 3 a_5 x^2 + \dots + (n+3)(n+2)(n+1)a_{n+3} x^n + \dots + \\ & \qquad \qquad \qquad - 2 \cdot 1 a_2 x^2 + \dots \qquad \qquad \qquad - n(n-1)a_n x^n \dots + \\ & \qquad \qquad \qquad + 2 a_1 x \quad + 2 \cdot 2 a_2 x^2 + \dots \qquad \qquad \qquad + 2n a_n x^n + \dots + \\ & - 2a_0 \quad - 2 a_1 x \quad - 2 a_2 x^2 \quad \dots \qquad \qquad \qquad - 2 a_n x^n \qquad = 0 \end{aligned}$$

De coëfficiënten van x^n ($n = 0, 1, 2, \dots$) moeten nu $= 0$ zijn, dus

$$\left\{ \begin{array}{l} 6a_3 - 2a_0 = 0 \\ 4 \cdot 3 \cdot 2 a_4 = 0 \\ 5 \cdot 4 \cdot 3 a_5 = 0 \\ \vdots \\ (n+3)(n+2)(n+1)a_{n+3} - n(n-1)a_n + 2na_n - 2a_n = 0 \end{array} \right. \implies \left\{ \begin{array}{l} a_3 = \frac{1}{3} a_0 \\ a_4 = 0 \\ a_5 = 0 \\ \vdots \\ (n+3)(n+2)(n+1)a_{n+3} = \\ = (n-1)(n-2)a_n \end{array} \right. \quad (5.5.2)$$

Hieruit volgt, dat

$$0 = a_4 = a_7 = a_{10} = \dots$$

$$0 = a_5 = a_8 = a_{11} = \dots$$

Verder blijkt, dat a_1 en a_2 niet in deze reeks van coëfficiënten voorkomen. Deze zijn dus willekeurig te kiezen. Bovendien is ook a_0 nog willekeurig te kiezen. Is a_0 vastgelegd, dan ook a_3 , a_6 enz.

We zien dus dat, als we $n = 3k$ stellen ($k = 0, 1, 2, \dots$) de algemene term wordt

$$\begin{aligned} a_{3(k+1)} &= \frac{(3k-1)(3k-2)a_{3k}}{(3k+3)(3k+2)(3k+1)} = \frac{(3k-1)(3k-2)(3k-4)(3k-5)}{(3k+3)(3k+2)(3k+1)3k(3k-1)(3k-2)} a_{3(k-1)} \\ &= \frac{(3k-1)(3k-2)\dots\dots\dots 5 \cdot 4}{(3k+3)(3k+2)\dots\dots\dots 9 \cdot 8 \cdot 7} a_6 = \\ &= \frac{(3k-1)(3k-2)\dots\dots\dots 5 \cdot 4 \cdot 2 \cdot 1}{(3k+3)\dots\dots\dots 9 \cdot 8 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 5 \cdot 4} \cdot \frac{1}{3} a_0 = \\ &= \frac{2}{(3k+2)(3k+1)3^{k+1}(k+1)!} a_0, \text{ dus.} \end{aligned}$$

$$a_{3k} = \frac{2}{(3k-1)(3k-2)3^k k!} a_0 \quad (k = 1, 2, \dots) \quad (5.5.3)$$

De algemene oplossing is dus

$$\begin{aligned} y &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_6 x^6 + \dots = \\ &= a_1 x + a_2 x^2 + 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_0}{(3k-1)(3k-2)3^k k!} x^{3k} \quad (5.5.4) \end{aligned}$$

Opmerkingen :

- a) In de algemene oplossing zitten 3 willekeurige constanten a_0 , a_1 en a_2 . Dit is duidelijk, want we hebben een d.v. van de 3e orde.
- b) De algemene oplossing (5.5.4) is te splitsen in 3 onafhankelijke oplossingen

$$y_1 = x ; y_2 = x^2 ; y_3 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{3k}}{(3k-1)(3k-2)3^k k!}.$$

De beide eersten zijn polynomen, de laatste een reeks, die niet tot de bekende typen behoort.

- c) De relatie (5.5.3) geldt zeker vanaf $k = 3$. Direct is in te zien, dat ze ook voor $k = 0, 1, 2$ nog opgaat.

We beschouwen nu een voorbeeld, waarbij de coëfficiënt van de hoogste orde afgeleide $\neq 1$ is.

$$x^2 y' - y = 0.$$

Als we nu delen door x^2 , dan wordt de coëfficiënt van y' weliswaar 1, maar de coëfficiënt van y , te weten $\frac{1}{x^2}$ is nu niet in een machtreeks in de omgeving van 0 te ontwikkelen. Door scheiding van variabelen blijkt direct $y = Ae^{-1/x}$.

Substitueren we $y = \sum_0^{\infty} a_n x^n$, dan volgt er

$$\sum_1^{\infty} n a_n x^{n+1} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0.$$

Er blijkt direct

$$a_0 = 0 ; a_1 = 0 ; n a_n - a_{n+1} = 0 \Rightarrow a_{n+1} = n a_n \quad n = 1, 2 \dots$$

dus $a_n = 0$ voor alle n .

De oorzaak hiervan ligt in het feit, dat $y = e^{1/x}$ in de omgeving van $x = 0$ niet in een machtreeks naar x ontwikkeld kan worden. Helaas behoren vele belangrijke d.v. tot dit type. Door middel van een kunstgreep is het toch mogelijk een dergelijke d.v. door middel van machtreeksen op te lossen. We gaan hier niet verder op in.

6. Stelsels differentiaalvergelijkingen

In het voorgaande hebben we steeds één d.v. met één onbekende functie y van x beschouwd.

We kunnen echter ook een stelsel differentiaalvergelijkingen met verschillende onbekende functies van x beschouwen. Als voorbeeld hiervan nemen we lineaire differentiaalvergelijkingen met constante coëfficiënten

Voorbeelden :

$$1) \quad \begin{cases} y + \frac{dz}{dx} + z = C \\ \frac{dy}{dx} + 2z = 0 \end{cases} \quad \text{op te lossen}$$

Het gaat hier heel eenvoudig, want uit de eerste vergelijking volgt

$$y = -\frac{dz}{dx} - z, \quad \text{dus}$$

$$\frac{d^2z}{dx^2} + \frac{dz}{dx} - 2z = 0 \quad \text{na substitutie in de tweede,}$$

$$\text{w.u.v.} \quad z = Ae^{-2x} + Be^x \quad \text{en dus}$$

$$y = -2Ae^{-2x} - Be^x + Ae^{-2x} - Be^x = -Ae^{-2x} - 2Be^x.$$

In het algemeen passen we, om dergelijke simultane systemen op te lossen 2 methoden toe, nl.

- a) eliminatie
- b) substitutie

$$2) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = 4x + 2y & (5.6.1) \\ \frac{dy}{dt} = -3x - y & \text{op te lossen} \end{cases} \quad (5.6.2)$$

Methode a :

We elimineren bv. x .

Differentiëren van (5.6.2) levert :

$$\frac{d^2y}{dt^2} = -3 \frac{dx}{dt} - \frac{dy}{dt} \quad (5.6.3)$$

Vermenigvuldig (5.6.1) en (5.6.2) resp. met 3 en 4 en tel op :

$$3 \frac{dx}{dt} + 4 \frac{dy}{dt} = 2y \implies 3 \frac{dx}{dt} = 2y - 4 \frac{dy}{dt}, \quad \text{dus}$$

$$\frac{d^2y}{dt^2} - 3 \frac{dy}{dt} + 2y = 0 \quad \text{wegens (5.6.3)}$$

met als algemene oplossing

$$y = Ae^t + Be^{2t} \quad \text{en}$$

$$\text{dus} \quad x = -\frac{2}{3} Ae^t - Be^{2t}.$$

Methode b :

Zoek een oplossing van de gedaante :

$$x = Ae^{\lambda t} \quad ; \quad y = Be^{\lambda t},$$

en substitueer dit in (5.6.1) en (5.6.2) ; dit levert :

$$\begin{cases} \lambda A e^{\lambda t} = 4A e^{\lambda t} + 2B e^{\lambda t} \\ \lambda B e^{\lambda t} = -3A e^{\lambda t} - B e^{\lambda t} \end{cases}, \quad \text{dus}$$

$$\begin{cases} \lambda A = 4A + 2B \\ \lambda B = -3A - B \end{cases} \implies \begin{cases} A(4 - \lambda) + 2B = 0 \\ 3A + B(1 + \lambda) = 0 \end{cases}$$

Zoals bekend is er slechts een oplossing voor A en B \neq de nuloplossing, als

$$\begin{vmatrix} 4 - \lambda & 2 \\ 3 & 1 + \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{karakteristieke vergelijking})$$

w.u.v. $\lambda_1 = 1$; $\lambda_2 = 2$.

We vinden dus voor $\lambda_1 = 1$: $3A + 2B = 0$
 en voor $\lambda_2 = 2$: $A + B = 0$.

Omdat de gegeven vergelijkingen lineair en homogeen zijn is de som van 2 oplossingen weer een oplossing, dus de algemene oplossing luidt

$$\begin{aligned} y &= A_1 e^t + A_2 e^{2t} \\ x &= -\frac{2}{3} A_1 e^t - A_2 e^{2t} . \end{aligned}$$

Bij n lin. homogene vergelijkingen met n onbekende functies gaat men analoog te werk.

Het kan voorkomen, dat de karakteristieke vergelijking meervoudige of complexe wortels heeft.

De behandeling hiervan verloopt analoog met die der gewone lineaire homogene differentiaalvergelijkingen, waar we vroeger al kennis mee hebben gemaakt.

HOOFDSTUK VI. NUMERIEKE INTEGRATIE VAN DIFFERENTIAALVERGELIJKINGEN

1. De Taylorreeks

We gaan uit van

$$\left. \begin{array}{l} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{array} \right\} \quad (6.1.1)$$

en willen berekenen $y(x_0 + h_0)$.

We ontwikkelen, aannemend dat dit in een omgeving van $x = x_0$ mogelijk is

$$y(x_0 + h_0) = y(x_0) + h_0 y'(x_0) + \frac{h_0^2}{2!} y''(x_0) + \dots \quad (6.1.2)$$

Nu is

$$y(x_0) = y_0$$

$$y'(x_0) = f(x_0, y_0)$$

$$y''(x_0) = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_0 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_0 (y')_0 = f_x(x_0, y_0) + f_y(x_0, y_0) f(x_0, y_0)$$

enzovoort.

Uitgaande van (6.1.2) kan men op dezelfde wijze $y(x_0 + h_0 + h_1)$ enz. berekenen, waarbij dan $y(x_0 + h_0 + h_1)$ wordt uitgedrukt in de afgeleiden van $y(x)$ in $x = x_0 + h_0$, maar die zijn niet exact bekend.

Om een oplossing te starten berekent men vaak eerst $y(x_0 \pm h)$ en $y(x_0 \pm 2h)$ uitgaande van de Taylorreeks in $x = x_0$.

We krijgen dan, als we stellen :

$$y_n = y(x + nh)$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$y_1 = y_0 + hy'_0 + \frac{h^2}{2!} y''_0 + \dots + \frac{h^5}{5!} y_0^{(5)} + \dots \quad (6.1.3)$$

$$y_2 = y_0 + 2hy'_0 + \frac{4h^2}{2!} y''_0 + \dots + \frac{32h^5}{5!} y_0^{(5)} + \dots \quad (6.1.4)$$

$$y_{-1} = y_0 - hy'_0 + \frac{h^2}{2!} y''_0 + \dots - \frac{h^5}{5!} y_0^{(5)} + \dots \quad (6.1.5)$$

$$y_{-2} = y_0 - 2hy'_0 + \frac{4h^2}{2!} y''_0 + \dots - \frac{32h^5}{5!} y_0^{(5)} + \dots \quad (6.1.6)$$

Opmerking :

Als y_1 uit y_0 gevonden is met (6.1.3) kunnen we omgekeerd als controle y_0 uit y_1 met (6.1.5) vinden.

Voorbeeld :

$$y' = x + y \quad \text{met } x_0 = 0 ; y_0 = 1. \quad (6.1.7)$$

Er volgt $y'' = 1 + y'$

$$y''' = y'' \quad \text{enzovoort, dus}$$

wegens de beginvoorwaarden

$$y'_0 = x_0 + y_0 = 1 ; y''_0 = 1 + y'_0 = 2 ; y_0^{(3)} = y_0^{(4)} = \dots = 2.$$

Neem $h = 0,1$, dan geeft de substitutie in (6.1.3) t/m (6.1.6)

$$y_1 = 1,1103 ; y_2 = 1,2428 ; y_{-1} = 0,9097 ; y_{-2} = 0,8375,$$

als we de ontwikkeling doorzetten tot $\frac{h^5}{5!} y_0^{(5)}$. Deze term is nl. hoogstens :

$$\frac{(0,2)^5}{5!} 2 = \frac{64}{120} 10^{-5} \sim \frac{1}{2} \cdot 10^{-5}.$$

Verder zijn

$$y'_1 = x_1 + y_1 = x_0 + h + y_1 = 1.2103$$

$$y'_2 = x_2 + y_2 = x_0 + 2h + y_2 = 1.4428$$

$$y'_{-1} = x_{-1} + y_{-1} = x_0 - h + y_{-1} = 0.8097$$

$$y'_{-2} = x_{-2} + y_{-2} = x_0 - 2h + y_{-2} = 0.6375.$$

Opmerking :

Men kan (6.1.7) ook door directe integratie vinden, (lin. d.v),
er volgt : $y = 2e^x - 1 - x$.

Het komt heel vaak voor, dat het bepalen van de hogere afgeleiden van
(6.1.1) een bewerkelijke affaire is.

We beginnen daarom zo eenvoudig mogelijk en verwaarlozen in (6.1.3)
de termen van de 2e graad in h.

Dus

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + O(h^2) \quad \text{en algemeen :}$$

$$y(x_0 + (n+1)h) = y(x_0 + nh) + hy'(x_0 + nh) + O(h^2)$$

of
$$\underline{y_{n+1} = y_n + hy'_n + O(h^2)}. \quad \text{(Euler)} \quad (6.1.8)$$

Ook kunnen we als volgt te werk gaan

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2!} y''_n + \frac{h^3}{3!} y'''_n + O(h^4)$$

$$\underline{y_{n-1} = y_n - hy'_n + \frac{h^2}{2!} y''_n - \frac{h^3}{3!} y'''_n + O(h^4)}$$

$$\underline{y_{n+1} = y_{n-1} + 2hy'_n + O(h^3)}. \quad (6.1.9)$$

(6.1.9) is dus nauwkeuriger dan (6.1.8) voor kleine h.

Om (6.1.8) te starten hebben we (x_0, y_0) nodig, om (6.1.9) te starten (x_0, y_0) en (x_1, y_1) , immers uit (6.1.9) volgt

$$y_2 = y_0 + 2hy_1' + O(h^3),$$

waarbij y_1' volgt uit (6.1.1) door substitutie van x_1, y_1 .

Het schema passend bij (6.1.9) wordt dus :

a) Bereken y_{n+1} uit $y_{n+1} = y_{n-1} + 2hy_n'$.

b) Bepaal $y_{n+1}' = f(x_{n+1}, y_{n+1})$

en herhaal deze berekeningen voor elke volgende stap.

Voorbeeld

$$y' = -2xy^2 \quad y(0) = 1. \quad (6.1.10)$$

De exacte oplossing is, zoals direct blijkt $y = \frac{1}{1+x^2}$.

Differentiëren van (6.1.10) geeft

$$y'' = -2y^2 - 4xyy', \quad \text{dus}$$

$$y(0) = 1 \quad ; \quad y'(0) = 0 \quad ; \quad y''(0) = -2.$$

(6.1.3) levert als we afbreken na de term met h^2

$$y(h) = 1 + 0 \cdot h + \frac{h^2}{2!} \cdot -2 = 1 - h^2.$$

Nemen we voor $h = 0,1$, dan volgt er : $x_1 = x_0 + h = 0,1$, dus

$$y(0,1) = 0,990 \quad \text{en wegens (6.1.10) : } y_1' = -0,196.$$

Met (6.1.9) volgt nu

$$y_2 = y_0 + 2 \cdot 0,1 \cdot y_1' = 1 - 0,2 \times 0,196 = 0,961 \quad \text{enzovoort.}$$

We krijgen de volgende

TABEL I

D.V. $y' = -2xy^2$; $y(0) = 1$; $h = 0.1$. Exacte oplossing $\frac{1}{1+x^2}$.

	x	y	y'	$\frac{1}{1+x^2}$	fout
x_0	0	1.000	0	1.000	0
x_1	0.1	0.990	-0.196	0.990	0
x_2	.2	.961	.370	.962	-1
x_3	.3	.916	.503	.917	-1
x_4	.4	.860	.592	.862	-2
x_5	.5	.798	.637	.800	-2
x_6	.6	.733	.644	.735	-2
x_7	.7	.669	.627	.671	-2
x_8	.8	.608	.592	.610	-2
x_9	.9	.551	.547	.552	-1
x_{10}	1.0	.499	.498	.500	-1

We zullen voor deze methode een schatting geven van de fout, die we maken, waarbij we afrondingsfouten buiten beschouwing laten.

Stel, dat de juiste oplossing voor x_n gelijk is aan $z_n(x_n) \equiv z_n$, terwijl e_n de fout is.

Dan is : $y_n - z_n = e_n$ en wegens (6.1.9)

$$y_{n+1} - y_{n-1} = 2h f(x_n, y_n). \text{ Verder blijkt } z_{n+1} - z_{n-1} = 2hf(x_n, z_n) + T_n$$

waarbij $T_n = \frac{h^3}{3} z'''(\xi)$, met $x_{n-1} < \xi < x_{n+1}$.

Dan is dus

$$e_{n+1} - e_{n-1} = 2h [f(x_n, y_n) - f(x_n, z_n)] - T_n.$$

Wegens de middelwaardestelling is

$$f(x_n, y_n) - f(x_n, z_n) = (y_n - z_n) \frac{\partial f(x_n, y)}{\partial y}; \quad (y \text{ tussen } y_n \text{ en } z_n).$$

dus

$$e_{n+1} - e_{n-1} = 2h e_n g_n - T_n \quad (6.1.11)$$

als we $\frac{\partial f(x_n, y)}{\partial y} = g_n$ stellen.

Deze recurrente betrekking kan opgelost worden, als we g_n en T_n kennen voor elke n .

We nemen aan, dat deze grootheden slechts zeer langzaam veranderen, en wel zodanig, dat we ze constant kunnen rekenen.

We stellen $g_n \equiv g$ en $T_n \equiv T$ (g en T constant).

Er volgt dan

$$e_{n+1} - 2hge_n - e_{n-1} = -T. \quad (6.1.12)$$

We lossen eerst de differentievergelijking

$$e_{n+1} - 2hge_n - e_{n-1} = 0$$

op door te stellen

$$e_n = r^n.$$

Dit levert

$$r^2 - 2hgr - 1 = 0,$$

met wortels r_1 en r_2 .

Als oplossing vinden we dus $e_n = \lambda r_1^n + \mu r_2^n$.

We trachten nu (6.1.12) op te lossen door te stellen

$$e_n = \lambda r_1^n + \mu r_2^n + C, \quad C \text{ constant.}$$

Er volgt

$$C - 2hgC - C = -T \Rightarrow C = \frac{T}{2hg}.$$

De algemene oplossing van (6.1.12) is dan

$$e_n = \lambda r_1^n + \mu r_2^n + \frac{T}{2hg}. \quad (6.1.13)$$

Nu is, zoals bekend, $r_1 r_2 = -1$, dus tenzij $|r_1| = |r_2|$ is altijd één der wortels in absolute waarde > 1 .

Het gevolg hiervan is, dat bij toenemende n e_n exponentieel toeneemt.

We hebben hier een zgn. instabiele recursievergelijking.

Voor kleine n en kleine h hoeft dit niet ernstig te zijn. Er blijkt hieruit, dat we dus voorzichtig te werk moeten gaan bij het gebruik van (6.1.9).

We beschouwen nu nog (6.1.8).

Op analoge wijze als hierboven vinden we

$$z_{n+1} = z_n + h z_n' + T_n \quad (T_n = \frac{1}{2} h^2 z''(\xi), \quad \xi \text{ tussen } x_n \text{ en } x_{n+1})$$

en dus

$$e_{n+1} = e_n + h g e_n - T,$$

als we g_n en T_n weer constant beschouwen.

De algemene oplossing is in dit geval

$$e_n = (1 + hg)^n + \frac{T}{hg}.$$

Als $|(1 + hg)| < 1$ of $-2 < hg < 0$,

groeit de fout dus niet aan bij toenemende n onder de gemaakte afspraken.

In dat geval spreken we van een stabiele recursievergelijking. Nu is h positief, dus moet men om een stabiele oplossing te krijgen h zodanig nemen, dat

$$0 < h < \left| \frac{2}{g} \right| \text{ is.}$$

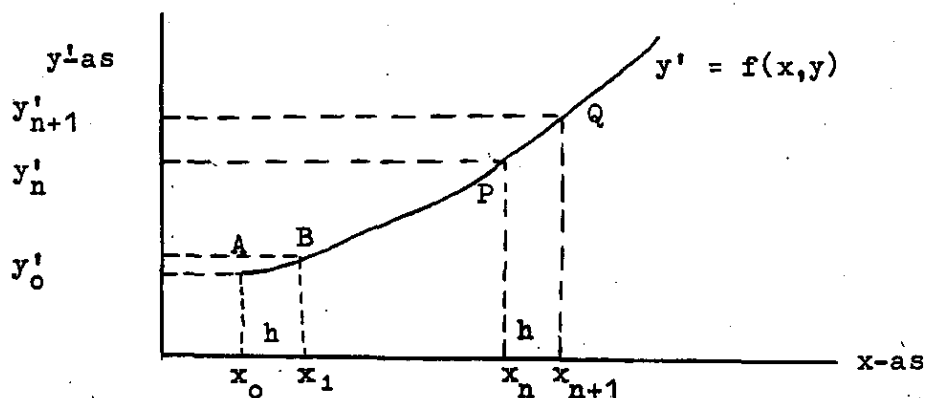
(g is negatief). Voor positieve g is er dus geen stabiele oplossing.

2. De trapeziumregel

Gegeven zij

$$y' = f(x,y)$$

$$y(x_0) = y_0.$$



Het oppervlak van de figuur $x_0 x_1 BA$ is zoals bekend :

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x,y) dx, \text{ dus er volgt}$$

$$y_1 = \int_{x_0}^{x_1} f(x,y) dx + y_0, \dots, y_{n+1} = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y) dx + y_n, \dots$$

Als h klein is, kunnen we het oppervlak goed benaderen door dat van het trapezium $x_0 x_1 BA$.

Dit geeft

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{2}h(y'_0 + y'_1) \text{ en in het algemeen :}$$

$$\underline{\underline{y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(y'_n + y'_{n+1})}} \quad (6.2.1)$$

Het procedé werkt als volgt :

Stel, dat de berekening is uitgevoerd tot x_n .

- a) Voorspel \bar{y}_{n+1} met (6.1.9).
- b) Bereken \bar{y}'_{n+1} met $\bar{y}'_{n+1} = f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1})$.
- c) Verbeter y_{n+1} met (6.2.1), waarbij men voor y'_{n+1} het zojuist gevonden getal invult.
- d) Verbeter y'_{n+1} met $y'_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$.
- e) Herhaal c) en d) tot geen verandering meer optreedt.

Voorbeeld :

$$y' = -2xy^2 \quad y(0) = 1.$$

Oplossing : $y'_0 = (-2xy^2)_{x=0} = 0$. Neem $h = 0,1$, dan volgt

$$\bar{y}_1 = y_0 + hy'_0 = 1, \quad \text{dus } \bar{y}'_1 = -2x_1 \bar{y}_1^2 = -2 \cdot 0,1 = -0,2.$$

De tweede benadering wordt nu :

$$\bar{\bar{y}}_1 = 1 + \frac{0 - 0,2}{2} h = 0,990.$$

De tweede benadering voor y'_1 is :

$$\bar{\bar{y}}'_1 = -2 \cdot 0,1 \cdot (0,99)^2 = -0,196$$

$$\text{dus } \bar{\bar{\bar{y}}}_1 = 1 + \frac{0 - 0,196}{2} h = 0,990.$$

Daar $\bar{\bar{y}}_1$ en $\bar{\bar{\bar{y}}}_1$ hetzelfde zijn, nemen we voor $y_1 : y_1 = 0,99$.
Op analoge wijze worden y_2 enzovoort bepaald.
Tabel II geeft de berekening volgens deze methode.

Zijn de stappen, die we uitvoeren nu zo, dat we een convergent proces hebben ?
Zonder bewijs zij hier meegedeeld, dat er convergentie optreedt, als

$$|hg| < 2,$$

waarbij weer geldt $g \equiv \frac{f(x,y)}{y}$ in het betreffende vak.

Als we nog invoeren $C_0 \equiv$ gecorrigeerde waarde - voorspelde waarde dus C_0 is het verschil van \bar{y}_{n+1} , verkregen uit (6.1.9) en de uiteindelijke y_{n+1} verkregen uit (6.2.1), dan kan men bewijzen dat de afbreekfout

$$\underline{\underline{T}} \sim \frac{C_0}{5} \text{ is.} \quad (6.2.2)$$

Opm.: We kiezen h liefst zo klein, dat reeds na één of twee iteraties de gewenste overeenstemming is bereikt.

TABEL II

$$y' = -2xy^2 ; y(0) = 1 ; h = 0,1 ; \text{ exacte oplossing } \frac{1}{1+x^2}$$

x	y	y'	C_0	$\frac{1}{1+x^2}$	fout
0.0	1.000	0	0.000	1.000	0
.1	0.990	-0.196	0	0.990	0
.2	.962	.370	1	.962	0
.3	.918	.506	2	.917	1
.4	.863	.596	2	.862	1
.5	.801	.642	2	.800	1
.6	.737	.650	1	.735	2
.7	.672	.632	1	.671	1
.8	.611	.597	1	.610	1
.9	.554	.552	1	.552	2
1.0	.501	.502	0	.500	1

Een ander voorbeeld, dat ons het belang van C_0 illustreert, is het volgende

$$y' = -2xy^2 ; y(0) = -1.$$

De exacte oplossing is $y = \frac{1}{x^2 - 1}$.

TABEL III

$$y' = -2xy^2 ; y(0) = -1 ; h = 0,1 ; \text{ exacte oplossing } \frac{1}{x^2 - 1}$$

x	y	y'	C_0	$\frac{1}{x^2-1}$	fout
0.0	-1.000	0		-1.000	0
.1	.010	-0.204		.010	0
.2	.042	.434	-0.001	.042	0
.3	.100	.726	3	.099	- 1
.4	.193	-1.139	6	.190	- 3
.5	.339	.790	11	.333	- 6
.6	.578	-2.988	27	.563	- 16
.7	-2.010	-5.656	73	-1.961	- 39
.8	-3.024	-4.631	315	-2.778	- 246
.9				-5.263	
1.0				$-\infty$	

N.B. Bij 0.9 itereert het proces niet meer naar een eindige waarde. Wil men nauwkeurigheid tot in 3 decimalen, dan mag C_0 het bedrag 0.0025 niet overschrijden. Gebeurt dit, dan moet men h verkleinen. We zien, dat de fout sterk toeneemt, maar C_0 waarschuwt ons dat dit gebeuren gaat. Om nog eens duidelijk de noodzakelijkheid van controle te onderstrepen, zullen we op het laatste voorbeeld alleen (6.1.9) toepassen.

TABEL IV.

$$y' = -2xy^2 ; y(0) = -1 ; h = 0.1.$$

x	y	y'
0.0	-1.000	0
.1	.010	- 0.204
.2	.041	.434
.3	.097	.722
.4	.185	1.124
.5	.322	.748
.6	.535	2.827
.7	.887	4.985
.8	-2.532	10.258
.9	-3.939	27.929
1.0	-8.118	

Het loopt schijnbaar allemaal erg glad en men heeft geen idee, dat bij $x = 1.0$ de fout ∞ groot is.

3. Milne's methode

We gaan uit van (6.1.3) en (6.1.5).
Differentiëren geeft

$$y'_1 = y'_0 + hy''_0 + \frac{h^2}{2!} y'''_0 + \dots \quad (6.3.1)$$

en

$$y'_{-1} = y'_0 - hy''_0 + \frac{h^2}{2!} y'''_0 - \dots \quad (6.3.2)$$

Optellen en aftrekken levert

$$y'_1 + y'_{-1} = 2y'_0 + h^2 y_0^{(3)} + \frac{h^4}{12} y_0^{(5)} + \dots \quad (6.3.3)$$

en

$$y'_1 - y'_{-1} = 2hy''_0 + \frac{h^3}{3} y_0^{(4)} + \dots \quad (6.3.4)$$

Uit (6.3.3) en (6.3.4) lossen we $y_0^{(3)}$ en $y_0^{(4)}$ op en substitueren dit in (6.1.3) en (6.1.5). Er volgt

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{24} (y'_{-1} + 16y'_0 + 7y'_1) + \frac{h^2}{4} y''_0 - \frac{h^5}{180} y_0^{(5)} + \dots \quad (6.3.5)$$

en

$$y_{-1} = y_0 - \frac{h}{24} (7y'_{-1} + 16y'_0 + y'_1) + \frac{h^2}{4} y''_0 + \frac{h^5}{180} y_0^{(5)} + \dots \quad (6.3.6)$$

Op analoge wijze vinden we door substitutie van $y_0^{(3)}$ en $y_0^{(4)}$ in (6.1.4) en (6.1.6)

$$y_2 = y_0 + \frac{2h}{3} (5y'_1 - y'_0 - y'_{-1}) - 2h^2 y''_0 + \frac{7}{45} h^5 y_0^{(5)} + \dots \quad (6.3.7)$$

en

$$y_{-2} = y_0 - \frac{2h}{3} (5y'_{-1} - y'_0 - y'_1) - 2h^2 y''_0 - \frac{7}{45} h^5 y_0^{(5)} + \dots \quad (6.3.8)$$

Door aftrekking van (6.3.5) en (6.3.6) volgt nog

$$y_1 = y_{-1} + \frac{h}{3} (y'_{-1} + 4y'_0 + y'_1) - \frac{h^5}{90} y_0^{(5)} \dots \quad (6.3.9)$$

of algemeen

$$\underline{y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3} (y'_{n+1} + 4y'_n + y'_{n-1}) + O(h^5). \text{ (Simpson)}} \quad (6.3.10)$$

Op analoge wijze verkrijgt men

$$\underline{y_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4h}{3} (2y'_n - y'_{n-1} + 2y'_{n-2}) + O(h^5).} \quad (6.3.11)$$

(Zie voor deze beide laatste formules ook blz 45).

We kunnen dus bijv. (6.3.11) als "predictor" en (6.3.10) als "corrector" gebruiken.

De start vereist vier bekende waarden van y .

Deze kunnen gevonden worden :

a) door gebruik te maken van de Taylorreeks ;

b) door successieve benaderingen, verkregen door herhaalde toepassing van (6.3.5), (6.3.6), (6.3.7) en (6.3.8) of (6.3.10).

Immers x_0 en y_0 zijn gegeven, y'_0 en y''_0 kunnen direct bepaald worden.

Geschatte waarden \bar{y}'_1 en \bar{y}'_{-1} worden gevonden met

$$\bar{y}'_1 = y'_0 + hy''_0 \quad \text{en} \quad \bar{y}'_{-1} = y'_0 - hy''_0, \text{ waarbij we termen met } h^2$$

verwaarlozen.

Met (6.3.5) en (6.3.6) vinden we \bar{y}_1 en \bar{y}_{-1} .

Bereken hiermee y'_1 en y'_{-1} nogmaals uit de d.v. en bereken met deze waarden \bar{y}_1 en \bar{y}_{-1} uit (6.3.5) en (6.3.6).

Herhaal dit proces tot geen verandering meer optreedt, voorzover de nauwkeurigheid vereist.

Bereken daarna y_2 met (6.3.7) en met Simpson. Dit wordt net zo lang herhaald, tot ook hier geen verandering meer optreedt. De vier waarden y_{-1} , y_0 , y_1 en y_2 kunnen we nu als start gebruiken.

Voorbeeld : $y' = x - y$; $y(0) = 2$; $h = 0,1$.

x	y	y'	
-0.1	2.215	-2.3	} eerste benadering
0.0	2.000	-2.0	
0.1	1.815	-1.7	
-0.1	2.2155	-2.315	} tweede benadering
0.0	2.0000	-2.000	
0.1	1.8145	-1.715	
-0.1	2.21551	-2.3155	} derde benadering
0.0	2.00000	-2.0000	
0.1	1.81451	-1.7145	
-0.1	2.21551	-2.31551	} eerste benadering van y_2
0.0	2.00000	-2.00000	
0.1	1.81451	-1.71451	
0.2	1.65620	-1.45620	
-0.1	2.21551	-2.31551	} <u>startwaarden</u>
0.0	2.00000	-2.00000	
0.1	1.81451	-1.71451	
0.2	1.65619	-1.45619	

We gebruiken nu (6.3.11) om een waarde voor y_3 te "voorspellen":

$$y_3 = 1.52246 \quad \text{met} \quad y'_3 = -1.22246.$$

Als "corrector" gebruiken we Simpson, deze levert

$$y_3 = 1.52245 \quad \text{met} \quad y'_3 = -1.22245.$$

We beschouwen dit als de correcte waarde, daar nogmaals invullen in (6.3.10) geen verandering oplevert.

Met (6.3.11) vinden we nu $y_4 = 1.41097$, berekenen $y'_4 = -1.01097$ en passen weer Simpson als corrector toe $\Rightarrow y_4 = 1.41096$, wat weer als correct wordt beschouwd.

Zo gaan we verder en krijgen dan de volgende tabel

TABEL V

$$y' = x + y ; y_0 = 2 ; \text{ exacte oplossing } y = 3e^{-x} + x - 1$$

x	y	y'	C ₀	exact
-0.1	2.21551	-2.31551		} start
0.0	2.00000	-2.00000		
.1	1.81451	-1.71451		
.2	1.65619	-1.45619		
.3	1.52245	-1.22245	-1	1.5224547
.4	1.41096	-1.01096	-1	1.4109601
.5	1.31959	-0.81959	-1	1.3195920
.6	1.24644	-0.64644	0	1.2464349
.7	1.18975	-0.48975	0	1.1897559
.8	1.14799	-0.34799	0	1.1479869
.9	1.11970	-0.21970	-1	1.1197090
1.0	1.10364	-0.10364	-1	1.1036383
.1	1.09860	+0.00140	-1	1.0986133
.2	1.10359	+0.09641	0	1.1035826

Opmerkingen

- 1) Een nadeel van deze methode is, dat ze instabiel is. Het is dus van het grootste belang de startwaarden zeer nauwkeurig te bepalen met een zo groot mogelijk aantal decimalen.
- 2) Men kan aantonen, dat hier geldt

$$T \sim \frac{C_0}{29}.$$

Zolang T niet significant is nemen we aan, dat de waarde, gevonden met Simpson, correct is.

Plotselinge veranderingen in C₀ duiden op aanwezigheid van fouten.

Als $\frac{C_0}{29}$ groter blijkt dan de gewenste nauwkeurigheid toestaat, moet men h verkleinen.

Halvering van h geeft een verkleiningsfactor in de fout van 32.

- 3) Bij de eerste waarden uit de tabel blijkt, dat C₀ verwaarloosbaar is. Men kan dan de stapgrootte verdubbelen en kijken of er nog voldoende nauwkeurigheid verkregen wordt. Door deze wijze van handelen wordt het werk gehalveerd. We behandelen daarom nogmaals hetzelfde voorbeeld als boven, met h = 0,2. Als startwaarden nemen we x = 0.6 ; 0.8 ; 1.0 ; 1.2, en berekenen y(1.4) ; y(1.6) ; y(1.8) en y(2).

TABEL VI

x	y	y'	C ₀	exact
0.6	1.24644			
0.8	1.14799	-0.34799		
1.0	1.10364	-0.10364		
1.2	1.10359	+0.09641		
1.4	1.13979	+0.26021	-11	1.1397909
1.6	1.20569	+0.39431	-9	1.2056896
1.8	1.29589	+0.50411	-9	1.2958967
2.0	1.40600	+0.59400	-8	1.4060058

4. Integratie met behulp van differentiesa) Methode van Adams

Bij deze methode wordt y_{n+1} gevonden uit formules, die y'_{n+1} niet bevatten, waarbij we dus achterwaartse differenties toepassen.

Uit formule (2.4.4) vindt men door integratie

$$y_1 - y_0 = \int_{x_0}^{x_0+h} f(x,y) dx = h \int_0^1 f(x_0+ph,y) dp = h(y'_0 + \frac{1}{2} \nabla y'_0 + \frac{5}{12} \nabla^2 y'_0 + \frac{3}{8} \nabla^3 y'_0 + \frac{251}{720} \nabla^4 y'_0 + \dots)$$

en in het algemeen

$$y_{n+1} = y_n + h(y'_n + \frac{1}{2} \nabla y'_n + \frac{5}{12} \nabla^2 y'_n + \frac{3}{8} \nabla^3 y'_n + \frac{251}{720} \nabla^4 y'_n + \dots) \quad (6.4.1)$$

In deze formule wordt y_{n+1} uitgedrukt in y_n en de achterwaartse differenties van y'_n . We noemen haar de "predictor".

Op analoge wijze vinden we uit (3.3.4)

$$y_1 = y_0 + h[y'_1 - \frac{1}{2} \nabla y'_1 - \frac{1}{12} \nabla^2 y'_1 - \frac{1}{24} \nabla^3 y'_1 - \frac{19}{720} \nabla^4 y'_1 + \dots],$$

en algemeen

$$y_{n+1} = y_n + h[y'_{n+1} - \frac{1}{2} \nabla y'_{n+1} - \frac{1}{12} \nabla^2 y'_{n+1} - \frac{1}{24} \nabla^3 y'_{n+1} - \frac{19}{720} \nabla^4 y'_{n+1} \dots]$$

waarbij y_{n+1} wordt uitgedrukt in y_n , y'_{n+1} en de differenties van y'_{n+1} .

We noemen deze formule de "corrector".

Adams methode volstaat met herhaalde toepassing van (6.4.1).

Er bestaat ook een gemodificeerde methode Adams, die tevens (6.4.2) gebruikt.

Het gebruik van deze methode eist een tabel van differenties van y' , die bij de start van de berekening niet voorhanden zijn en dus op andere wijze moeten worden verkregen. Dit kan geschieden met Taylor. Zij nu gegeven $y' = f(x,y)$ $y(x_0) = y_0$

en stel, dat we y_0, y_1, y_2, y_3, y_4 met hun afgeleiden al kennen.

We krijgen dan de volgende tabel

x	y	y'	$\nabla y'$	$\nabla^2 y'$	$\nabla^3 y'$	$\nabla^4 y'$
x_0	y_0	y'_0				
x_1	y_1	y'_1	$\nabla y'_1$			
x_2	y_2	y'_2	$\nabla y'_2$	$\nabla^2 y'_2$		
x_3	y_3	y'_3	$\nabla y'_3$	$\nabla^2 y'_3$	$\nabla^3 y'_3$	
x_4	y_4	y'_4	$\nabla y'_4$	$\nabla^2 y'_4$	$\nabla^3 y'_4$	$\nabla^4 y'_4$

y_5 is nu met (6.4.1) te bepalen. Bereken met de d.v. y'_5 en vul de tabel aan. Hierna berekent men y_6 enz.

Voorbeeld :

Los op $y' = x^2 - y^2$ met $y(-1) = 0$

Stel dat onze startwaarden zijn : $x = -1,2 ; -1,1 ; -1 ; -0,9 ; -0,8$.
We krijgen dan de volgende :

TABEL VII

$y' = x^2 - y^2 ; y(-1) = 0 ; h = 0,1$.

x	y	y'	$\nabla y'$	$\nabla^2 y'$	$\nabla^3 y'$	$\nabla^4 y'$	$\nabla^5 y'$
-1.2	-0.23916	1.38280					start
1.1	-0.10995	1.19791	-18489	-1302	1282		
1.0	0	1	-19791	-20	1059	-223	-78
0.9	0.09005	0.80189	-19811	1039	758	-301	11
.8	.16073	.61417	-18772	1797	468	-290	40
.7	.21350	.44442	-16975	2265	218	-250	80
.6	.25036	.29732	-14710	2483	48	-170	
.5	.27376	.17505	-12227	2531			
-0.4	.28619	.07809	-9696				

Een fout in de berekening manifesteert zich meestal in een plotselinge sterke verandering van de hoogste differentie, die in de tabel voorkomt. Een nadeel van de methode is, dat de convergentie slecht is.

b) Met somfuncties

We gebruiken hierbij formule (3.4.4) met $j = n + 1$ en formule (3.3.2). Het zijn

$$y_{n+1} = h\mu\delta^{-1}f_{n+1} - \frac{h}{12}\mu\delta f_{n+1} + \frac{11}{720}h\mu\delta^3 f_{n+1} + \dots \quad (6.4.3)$$

en

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf_n + \frac{h}{3}\delta^2 f_n - \frac{h}{90}\delta^4 f_n \dots \quad (6.4.4)$$

waarbij we (6.4.4) als "predictor" en (6.4.5) als "corrector" gebruiken.

In (6.4.3) en (6.4.4) kunnen we nog invoeren $P_n = hf_n$, dan worden ze

$$y_{n+1} = \mu\delta^{-1}P_{n+1} - \frac{1}{12}\mu\delta P_{n+1} + \frac{11}{720}\mu\delta^3 P_{n+1} + \dots \quad (\text{corr.}) \quad (6.4.5)$$

en

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2P_n + \frac{1}{3}\delta^2 P_n - \frac{1}{90}\delta^4 P_n + \dots \quad (\text{pred.}) \quad (6.4.6)$$

We gaan als volgt te werk :

Bereken met (6.4.6) y_{n+1} uit P_n en geschatte differenties.

Uit y_{n+1} vinden we een eerste benadering voor P_{n+1} , waarna we het differentieschema aanvullen.

Met (6.4.5) vinden we een betere y_{n+1} , enz.

De term $-\frac{1}{12}\mu\delta P_{n+1}$ moet dus nog geschat worden.

We kunnen starten met Taylor of met iteratie.

In beide gevallen moet de somfunctie aan de beginvoorwaarden worden aangepast, er volgt analoog wegens een formule op blz. 57

$$\mu \delta^{-1} P_0 = y_0 + \frac{1}{12} \mu \delta P_0 - \frac{11}{720} \mu \delta^3 P_0 + \dots \quad (6.4.7)$$

want $y_0 = h \mu \delta^{-1} f_0 - \frac{h}{12} \mu \delta f_0 + \dots$

Als voorbeeld van het iteratieproces behandelen we

$$y' = x^2 - y \quad ; \quad y(0) = 1.$$

We starten met $y(x) = 1.00000$ voor $x = -0.3(0.1) 0.3$
dus

x	y	$\delta^{-1}P$	P	δP	$\delta^2 P$
-0.3	1.00000	1.33600	-0.09100	- 500	
-0.2	1.00000	1.24500	-0.09600	- 300	200
-0.1	1.00000	1.14900	-0.09900	- 100	200
0.0	1.00000	1.05000	-0.10000	+ 100	200
0.1	1.00000	0.95100	-0.09900	+ 300	200
0.2	1.00000	0.85100	-0.09600	+ 500	200
0.3	1.00000	0.75500	-0.09100		

Toelichting

Voor $x = 0$ is $y' = -1.00000$, voor $x = -0.1$ en $x = 0.1$ is $y' = -0.99000$,
dus $P_0 = -0.100000$; $P_{-1} = -0.09900 = P_1$.

H.u.v.

$$\delta P_{-\frac{1}{2}} = -0.001 \quad ; \quad \delta P_{\frac{1}{2}} = 0.001 \Rightarrow \mu \delta P_0 = 0$$

dus wegens (6.4.7) $\mu \delta^{-1} P_0 = 1.000 \Rightarrow \delta^{-1} P_{-\frac{1}{2}} + \delta^{-1} P_{\frac{1}{2}} = 2.0000$.

Verder is : $\delta^{-1}P_{\frac{1}{2}} - \delta^{-1}P_{-\frac{1}{2}} = P_0 = -0.1 \Rightarrow \delta^{-1}P_{\frac{1}{2}} = 0.95000$ en $\delta^{-1}P_{-\frac{1}{2}} = 1.05000$.

Uit de nu gevonden waarden kan de bovenstaande tabel volledig gemaakt worden.

We passen nu (6.4.5) toe en vinden nieuwe y -waarden en daarmee een nieuwe differentietabel, immers

$$y_1 = \frac{1}{2}\{2\delta^{-1}P_{\frac{1}{2}} + P_1\} - \frac{1}{24}\{\delta P_{\frac{1}{2}} + \delta P_{\frac{3}{2}}\} \dots = \\ = \frac{1}{2}\{1.90 - 0.099\} - \frac{1}{24}\{0.0004\} = 0.90033 \text{ (zie de vorige tabel)}$$

$$y_{-1} = (\text{evenzo}) 1.09967$$

dus de nieuwe $\delta P_{\frac{1}{2}} + \delta P_{-\frac{1}{2}} = 0.01994$, waaruit met (6.4.7) volgt :

$$\delta^{-1}P_{-\frac{1}{2}} = 1.05083 \text{ enz.}$$

x	y	$\delta^{-1}P$	P	δP	$\delta^2 P$	$\delta^3 P$
-0.3	1.29100	1.39563	-0.12010			
- .2	1.19733	1.27553	.11573	437	239	
- .1	1.09967	1.15980	.10897	676	221	- 18
0.0	1.00000	1.05083	.10000	897	200	- 21
.1	.90033	.95083	.08903	1097	179	- 21
.2	.80267	.86180	.07627	1276	161	- 18
.3	.70900	.78553	.06190	1437		
		.72363				

Na enkele iteraties treedt geen verandering meer op, er volgt als eindresultaat

x	y	$\delta^{-1}P$	P	δP	$\delta^2 P$	$\delta^3 P$
-0.3	1.34014	1.40319	-.12501			
.2	1.21860	1.27818	.11786	715	122	
.1	1.10483	1.16032	.10949	837	112	- 10
0.0	1.00000	1.05083	.10000	949	100	- 12
.1	.90516	.95083	.08951	1049	89	- 11
.2	.82127	.86132	.07813	1138	83	- 6
.3	.74918	.78319	.06592	1221		
		.71727				

Het blijkt goed te kloppen met de analytische oplossing:

$$y = 2 - 2x + x^2 - e^{-x}.$$

Uit deze start kunnen we dus verder met (6.4.6) en (6.4.5).

Er moet gecontroleerd worden, dat de bij P_{n+1} behorende differenties y_n zouden kunnen beïnvloeden.

Om dit zoveel mogelijk te voorkomen, kiezen we h zo klein, dat $\delta^3 P$ geen invloed heeft

5. Methode van Runge-Kutta

We gaan weer uit van $y' = f(x,y)$ $y(x_0) = y_0$.

De reeks van Taylor

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n + \frac{h^2}{2!} y''_n + \frac{h^3}{3!} y'''_n + \dots \quad (6.5.1)$$

wordt hier vervangen door een formule van het type

$$y_{n+1} = y_n + h[\alpha_0 f(x_n, y_n) + \alpha_1 f(x_n + \mu_1 h, y_n + b_1 h) + \alpha_2 f(x_n + \mu_2 h, y_n + b_2 h) + \dots + \alpha_p f(x_n + \mu_p h, y_n + b_p h)] \quad (6.5.2)$$

waarbij de α 's, de μ 's en b 's geschikt gekozen constanten zijn en wel zò, dat als het rechterlid van (6.5.2) wordt ontwikkeld naar machten van h , de coëfficiënten van een van te voren vastgesteld aantal machten van h met die van (6.5.1) overeenstemmen.

Een voordeel van deze methode is, dat ze zelfstartend is, en dat een verandering van h gedurende de berekening geen enkele moeilijkheid geeft. Een nadeel is, dat iedere stap verschillende berekeningen van de waarde van $f(x,y)$ vereist, wat veel werk kan geven.

We zullen nu de b 's trachten uit te drukken als lineaire combinaties van de voorafgaande waarden van $f(x,y)$.

In de plaats van (6.5.2) schrijven we op

$$y_{n+1} = y_n + \alpha_0 k_0 + \alpha_1 k_1 + \dots + \alpha_p k_p \quad (6.5.3)$$

$$\begin{aligned}
 \text{met} \quad k_0 &= hf(x_n, y_n) \\
 k_1 &= hf(x_n + \mu_1 h, y_n + \lambda_{10} k_0) \\
 k_2 &= hf(x_n + \mu_2 h, y_n + \lambda_{20} k_0 + \lambda_{21} k_1) \\
 &\vdots \\
 k_p &= hf(x_n + \mu_p h, y_n + \lambda_{p0} k_0 + \lambda_{p1} k_1 + \dots + \lambda_{p,p-1} k_{p-1})
 \end{aligned}
 \tag{6.5.4}$$

waarbij α_k , μ_k en $\lambda_{l,m}$ nog te bepalen constanten zijn.

We zullen achtereenvolgens bekijken $p = 1$ en $p = 2$. Hogere waarden van p geven aanleiding tot veel rekenwerk en het principe verandert niet.

$p = 1$. In dit geval kunnen we voor λ_{10} en μ_1 schrijven : λ en μ , dus

$$y_{n+1} = y_n + \alpha_0 k_0 + \alpha_1 k_1 \tag{6.5.5}$$

$$\text{met} \quad k_0 = hf(x_n, y_n) ; k_1 = hf(x_n + \mu h, y_n + \lambda k_0). \tag{6.5.6}$$

We wensen nu door geschikte keuze van α_0 , α_1 , λ en μ de ontwikkeling van (6.5.5) naar machten van h zo ver mogelijk te laten overeenstemmen met (6.5.1).

We maken hierbij gebruik van de Taylorontwikkeling voor een functie van 2 variabelen.

Deze luidt

$$f(x + h, y + k) = f(x, y) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^n f,$$

waarbij dit als volgt dient te worden opgevat

$$n = 1 : \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right) f = h \frac{\partial f}{\partial x} + k \frac{\partial f}{\partial y} .$$

$$n = 2 : \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f = h^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2hk \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + k^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \text{ enz.}$$

Nu wordt

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(x_n + \mu h, y_n + \lambda k_0) = \\
 &h \left[f(x_n, y_n) + (\mu h \frac{\partial f}{\partial x} + \lambda k_0 \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{1}{2}(\mu^2 h^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2\mu\lambda h k_0 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \lambda^2 k_0^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2})) \right] + O(h^4) \\
 &= hf + h^2(\mu \frac{\partial f}{\partial x} + \lambda f \frac{\partial f}{\partial y}) + \frac{h^3}{2}(\mu^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2\mu\lambda f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \lambda^2 f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}) + O(h^4)
 \end{aligned}$$

als $f \equiv f(x_n, y_n)$; $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \Big|_{x_n, y_n}$; enz., terwijl $k_0 = hf$.

Er volgt dan

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} &= y_n + h(\alpha_0 + \alpha_1)f + h^2\alpha_1(\mu \frac{\partial f}{\partial x} + \lambda f \frac{\partial f}{\partial y}) + \\
 &+ \frac{h^3}{2} \alpha_1(\mu^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f\lambda \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \lambda^2 f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}) + O(h^4). \quad (6.5.7)
 \end{aligned}$$

Wegens de gegeven D.V. is echter

$$y' = f ; y'' = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} y' = \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial y}$$

$$y''' = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial f}{\partial y} + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) f =$$

$$= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial f}{\partial y} + f \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \cdot \text{enz.},$$

dus (6.5.1) wordt

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} = & y_n + hf + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right) + \\
 & + \frac{h^3}{6} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + f \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 \right) + O(h^4).
 \end{aligned}
 \tag{6.5.8}$$

We willen nu dat de coëfficiënten van de machten van h in (6.5.7) en (6.5.8) overeenstemmen. Dit levert de volgende relaties op :

$$\alpha_0 + \alpha_1 = 1 \quad ; \quad \mu \alpha_1 = \frac{1}{2} \quad ; \quad \lambda \alpha_1 = \frac{1}{2}.
 \tag{6.5.9}$$

Kies bijv. $\alpha_1 = c$ ($c \neq 0$), dan volgt er

$$\alpha_0 = 1 - c \quad ; \quad \alpha_1 = c \quad ; \quad \mu = \lambda = \frac{1}{2c}.
 \tag{6.5.10}$$

(6.5.7) reduceert zich nu tot

$$\begin{aligned}
 y_{n+1} = & y_n + hf + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right) + \\
 & + \frac{h^3}{8c} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) + O(h^4).
 \end{aligned}
 \tag{6.5.11}$$

De afwijking tussen (6.5.11) eventueel (6.5.5) en (6.5.8), eventueel (6.5.1) is te schrijven in de vorm

$$\begin{aligned}
 \tau_n = & - \left(\frac{h^3}{8c} - \frac{h^3}{6} \right) \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2f \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + f^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \right. \\
 & \left. + \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial f}{\partial y} + f \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{h^3}{8c} \frac{\partial f}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right) + O(h^4) \quad \text{of}
 \end{aligned}$$

$$T_n = -\frac{h^3}{24c} \left[(3 - 4c) y_n'''' - 3y_n'' \frac{\partial f}{\partial y} \right] + O(h^4). \quad (6.5.12)$$

Men kan in het algemeen c niet zo bepalen, dat de vorm tussen vierkante haken in (6.5.12) wegvalt.

Een geschikte keuze is $c = \frac{1}{2}$, want dan is

$$x_n + \mu h = x_{n+1} \quad (\text{zie (6.5.6)}).$$

Er komt dan

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_0 + k_1) + T_n \quad (6.5.13)$$

met

$$k_0 = hf(x_n, y_n); \quad k_1 = hf(x_{n+1}, y_n + k_0) \quad (6.5.14)$$

waarbij $T_n = -\frac{h^3}{12} \left[y_n'''' - 3y_n'' \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_{x_n, y_n} \right] + O(h^4). \quad (6.5.15)$

$p = 2$

(6.5.3) wordt nu

$$y_{n+1} = y_n + \alpha_0 k_0 + \alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 \quad (6.5.16)$$

met

$$\left. \begin{aligned} k_0 &= hf(x_n, y_n) \\ k_1 &= hf(x_n + \mu_1 h, y_n + \lambda_1 k_0) \\ k_2 &= hf(x_n + \mu_2 h, y_n + \lambda_2 k_0 + \lambda_3 k_1) \end{aligned} \right\} \quad (6.5.17)$$

Op analoge wijze als bij $p = 1$ vinden we

buigen we overeenstemming met de Taylorreeks tot en met de term in h^3 als voldaan is aan

$$\left. \begin{aligned}
 \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 &= 1 \\
 \alpha_1 \mu_1 + \alpha_2 \mu_2 &= \frac{1}{2} \\
 \alpha_1 \lambda_1 + \alpha_2 (\lambda_2 + \lambda_3) &= \frac{1}{2} \\
 \frac{1}{2} \alpha_1 \mu_1^2 + \frac{1}{2} \alpha_2 \mu_2^2 &= 1/6 \\
 \alpha_1 \mu_1 \lambda_1 + \alpha_2 \mu_2 (\lambda_2 + \lambda_3) &= 1/3 \\
 \frac{1}{2} \alpha_1 \lambda_1^2 + \frac{1}{2} \alpha_2 (\lambda_2 + \lambda_3)^2 &= 1/6 \\
 \alpha_2 \lambda_3 \mu_1 &= 1/6 \\
 \alpha_2 \lambda_1 \lambda_3 &= 1/6
 \end{aligned} \right\} (6.5.18)$$

Oplossing van dit stelsel levert

$$\lambda_1 = \mu_1 \quad ; \quad \mu_2 = \lambda_2 + \lambda_3.$$

$$\alpha_1 = \frac{\frac{1}{2} \mu_2 - \frac{1}{3}}{\mu_1 (\mu_2 - \mu_1)} \quad ; \quad \alpha_2 = \frac{\frac{1}{2} \mu_1 - \frac{1}{3}}{\mu_2 (\mu_1 - \mu_2)} \quad . \quad (6.5.19)$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{6 \alpha_2 \mu_1}.$$

We voeren μ_1 en μ_2 als parameters in, waarmee alle andere coëfficiënten vastgelegd zijn.
 Het blijkt niet mogelijk, om nu ook coëfficiënten van h^4 met elkaar in overeenstemming te brengen.
 De fout is dus steeds $O(h^4)$, ongeacht de keuze van μ_1 en μ_2 .

We kunnen voor μ_1 en μ_2 enkele eenvoudige waarden invullen.

a)

$$\mu_1 = \frac{1}{2} \quad ; \quad \mu_2 = 1 \implies \alpha_1 = \frac{2}{3} \quad ; \quad \alpha_2 = \frac{1}{6} \quad ; \quad \alpha_0 = \frac{1}{6} \quad ;$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \quad ; \quad \lambda_2 = -1 \quad ; \quad \lambda_3 = 2,$$

dus

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_0 + 4k_1 + k_2) + O(h^4) \quad (\text{Kutta}) \quad (6.5.20)$$

met

$$\begin{cases} k_0 = hf(x_n, y_n) \\ k_1 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_0) \\ k_2 = hf(x_n + h, y_n - k_0 + 2k_1) \end{cases}$$

$$b) \quad \mu_1 = \frac{1}{3}; \mu_2 = \frac{2}{3} \implies \alpha_0 = \frac{1}{4}; \alpha_1 = 0; \alpha_2 = \frac{3}{4}$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{3}; \lambda_2 = 0; \lambda_3 = \frac{2}{3}$$

dus

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{4}(k_0 + 3k_2) + O(h^4) \quad (\text{Heun}) \quad (6.5.21)$$

met

$$\begin{cases} k_0 = hf(x_n, y_n) \\ k_1 = hf(x_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{3}k_0) \\ k_2 = hf(x_n + \frac{2}{3}h, y_n + \frac{2}{3}k_1) \end{cases}$$

Het in de praktijk meest voorkomende geval is $p = 4$ (vierde-orde methode).

Het resultaat wordt

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3) + O(h^5) \quad (6.5.22)$$

met

$$\begin{cases} k_0 = hf(x_n, y_n) \\ k_1 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_0) \\ k_2 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 = hf(x_n + h, y_n + k_2) \end{cases}$$

Voorbeeld :

$$y' = -xy \quad y(0,5) = 0.88249690 \quad h = 0,1 \quad (\text{exact } y = e^{-\frac{1}{2}x^2})$$

De eerste stap bestaat uit het berekenen van k_0 , k_1 , k_2 en k_3 door achtereenvolgende substituties in de gegeven d.v. Daaruit volgt dan y_1 met (6.5.22). Een nieuwe serie k 's wordt nu berekend, waarna y_2 volgt, enz.

x	y	y'	k_0	k_1	k_2	k_3	fout
0.5	0.88249690	-0.44124845	-0.04412485	-0.04732390	-0.04723592	-0.05011566	0
.6	.83527021	.50116213	.05011621	.05266379	.05258099	.05478825	0
.7	.78270454	.54789318	.05478932	.05664824	.05657853	.05809008	0
.8	.72614905	.58091924	.05809192	.05925376	.05920438	.06002502	1
.9	.66697685	.60027916	.06002792	.06051147	.06048851	.06064883	4
1.0	.60653073						7

Opmerkingen :

In het voorgaande zijn verschillende methoden besproken om de d.v. $y' = f(x,y)$ numeriek op te lossen. We wijzen er nogmaals op, dat zeer nauwkeurige startwaarden van het grootste belang zijn.

Gebruikt men de Taylorreeks (6.1.2), dan is het voordelig h zo te kiezen, dat 3 of 4 termen der reeks reeds voldoende zijn, om de gewenste nauwkeurigheid te verkrijgen.

Het starten met de methode van Milne (zie § 3) vereist betrekkelijk weinig werk, in tegenstelling met Runge-Kutta, die in het algemeen bewerkelijk is. Stabiliteitsoverwegingen spreken natuurlijk ook een zeer voorname rol, vooral als er een groot aantal stappen moet worden gedaan.

De in het voorgaande behandelde methoden kunnen we in 2 groepen onderverdelen :

- niet zelfstartend (Milne, Adams)
- zelfstartend (Euler, Runge-Kutta).

Bij de laatste methode is het grote voordeel, dat ze stabiel is, en een verandering van stapgrootte onderweg levert geen extra moeilijkheden op. Een nadeel is, dat de berekeningen van $f(x,y)$ omvangrijk kunnen zijn en dus veel tijd kosten.

Ook simultane systemen kunnen op analoge wijze met deze methode worden behandeld (zie opmerking na 6). Een praktische vuistregel bij R.K. is de volgende : Het verschil tussen k_1 en k_2 mag 2 à 3 % zijn van dat tussen k_0 en k_1 .

Wordt dit overschreden, dan moet h verkleind worden.

Een vrij grove regel is nog de volgende :

Stel dat het resultaat met stapgrootte h : \bar{y} is
 en " " " " $2h$: $\bar{\bar{y}}$

Def : $\delta \equiv \frac{1}{15} (\bar{\bar{y}} - \bar{y})$, dan is de gecorrigeerde
 $[y] = \bar{y} - \delta$

Tenslotte nog een opmerking betreffende bovengenoemde vuistregel, als men deze niet toepast :

$y' = \frac{4y}{1+x}$; $y(0)=1$, $h=0,1$ geeft een fout in $y(1)$ van 0.00242

$y' = \frac{2y}{1+x}$; $y(0)=1$, $h=0,1$ geeft een fout in $y(1)$ van 0.6000205

$y' = \frac{5y}{1+x}$; $y(0)=1$, $h=0,1$ geeft een fout in $y(1)$ van 0.0133

6. Hogere afgeleiden en stelsels differentiaalvergelijkingen

In het voorgaande hebben we slechts differentiaalvergelijkingen van de eerste orde beschouwd.

We beschouwen nu een stelsel lin. D.V. van de eerste orde van de gedaante

$$\left. \begin{array}{l} y_1' = f(x, y_1, \dots, y_n) \\ \vdots \\ y_n' = f_n(x, y_1, \dots, y_n) \end{array} \right\} \quad (6.6.1)$$

met zekere beginvoorwaarden en geven hieronder een voorbeeld, hoe men een dergelijk stelsel numeriek kan oplossen.

Indien men een d.v. heeft van de gedaante

$$y^{(n)} = f(y^{(n-1)}, y^{(n-2)}, \dots, y', y, x) \quad n \geq 1 \quad (6.6.2)$$

kan men deze voor substitutie van

$$\left. \begin{array}{l} y = y_0 \\ y' = y_1 \\ \vdots \\ y^{(n-1)} = y_{n-1} \end{array} \right\}$$

omzetten tot een stelsel differentiaalvergelijkingen van de eerste orde

$$\left. \begin{array}{l} y_0' = y_1 \\ y_1' = y_2 \\ \vdots \\ y_{n-2}' = y_{n-1} \\ y_{n-1}' = f(y_{n-1}, \dots, y_1, y_0, x) \end{array} \right\} \quad (6.6.3)$$

van n onbekende functies van x , nl. y_0, \dots, y_{n-1} .

Hiermee is (6.6.2) dus tot (6.6.1) teruggebracht.

Voorbeeld :

$$\text{Los op } \left. \begin{array}{l} u' = vw \\ v' = -uw \\ w' = -\frac{1}{2}uv \end{array} \right\}$$

met u, v en w functies van de onafhankelijk variabele x , terwijl $u(0) = 0$; $v(0) = w(0) = 1$.

We bepalen eerst 3 startwaarden in $x = -0.1$; $x = 0$; $x = 0.1$
 en voor $x = 0.2$ een geschatte waarde.
 Uit (6.6.4) volgt door differentiatie

$$\left. \begin{aligned} u'' &= v'w + vw' \\ u^{(3)} &= v''w + 2v'w' + vw'' \\ u^{(4)} &= v^{(3)}w + 3v''w' + 3v'w'' + vw^{(3)} \end{aligned} \right\} \quad (6.6.5)$$

We kunnen verder u , v en w ontwikkelen volgens Taylor, dus

$$u(x) = u(0) + xu'(0) + \frac{x^2}{2!} u''(0) + \frac{x^3}{3!} u'''(0) + \dots \quad \text{en}$$

analoog voor $v(x)$ en $w(x)$.

Wegens (6.6.5) is dan

$$\begin{aligned} u &= x - \frac{x^3}{4} + \dots \\ v &= 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{8} + \dots \\ w &= 1 - \frac{x^2}{4} + \frac{3x^4}{32} + \dots, \text{ zoals direct blijkt.} \end{aligned}$$

We substitueren nu $x = -0.1$; 0 ; 0.1 en vinden

$$x = -0.1 \begin{cases} u = -0.09975 \\ v = 0.99501 \\ w = 0.99751 \end{cases} \implies \begin{cases} u' = 0.99253 \\ v' = 0.09950 \\ w' = 0.04963 \end{cases}$$

$$x = 0 \begin{cases} u = 0 \\ v = 1 \\ w = 1 \end{cases} \implies \begin{cases} u' = 1 \\ v' = 0 \\ w' = 0 \end{cases}$$

$$x = 0.1 \begin{cases} u = 0.09975 \\ v = 0.99501 \\ w = 0.99751 \end{cases} \implies \begin{cases} u' = 0.99253 \\ v' = -0.09950 \\ w' = -0.04963 \end{cases}$$

in 5 decimalen nauwkeurig

en als schatting

$$u' = vw ; v' = -uw ; w' = -\frac{1}{2}uv ; u(0) = 0 ; v(0) = w(0) = 1 ; h = 0,2$$

$$x = 0.2$$

$$\left\{ \begin{array}{l} F = 0.19800 \\ V = 0.98020 \\ W = 0.99015 \end{array} \right.$$

In onderstaande tabel is de berekening uitgevoerd met Milne (6.3).

TABEL IX :

x	u	u'	C ₀	v	v'	C ₀	w	w'	C ₀
-0.1	-0.09975	.99253		0.99501	0.09950		0.99751	0.04963	
0.0	0	1.00000		1.00000	0		1.00000	0	
.1	0.09975	.99253		.99501	-.09950		.99751	.04963	
.2	.19802	.97055	2	.98020	.19607	0	.99015	.09705	0
.3	.29341	.93518	2	.95598	.28703	-1	.97824	.14025	-1
.4	.38467	.88826	2	.92306	.37017	-1	.96230	.17754	-1
.5	.47075	.83194	1	.88226	.44390	-3	.94297	.20766	-2
.6	.55083	.76871	1	.83462	.50733	-2	.92103	.22987	-2
.7	.62434	.70090	-1	.78115	.56020	-1	.89727	.24385	-1
.8	.69093	.63077	0	.72292	.60286	-2	.87253	.24974	-1
.9	.75048	.56016	-1	.66089	.63609	-1	.84758	.24799	-1
1.0	.80300	.49059	-1	.59598	.66100	-1	.82316	.23929	-1

Opmerking

Wil men op stelsels als boven Runge-Kutta toepassen dan kan men bijv. voor n vergelijkingen van het type (6.6.1) gebruiken

$$y_i(x+h) = y_i(x) + \frac{1}{6} (k_{0i} + 4k_{1i} + k_{2i}) + O(h^4)$$

met

$$\begin{cases} k_{0i} = hf_1(x, y_1, \dots, y_n) \\ k_{1i} = hf_1(x + \frac{1}{2}h, y_1 + \frac{1}{2}k_{01}, \dots, y_n + \frac{1}{2}k_{0n}) \\ k_{2i} = hf_1(x + h, y_1 + 2k_{11} - k_{01}, \dots, y_n + 2k_{1n} - k_{0n}) \end{cases} \quad (6.6.6)$$

7. Tweede orde vergelijkingen

We gaan uit van

$$y'' = f(x, y). \quad (6.7.1)$$

Men kan sommige D.V.'s tot deze gedaante herleiden, bijv. de algemene lineaire vergelijking :

$$y'' + f(x) y' + g(x) y = h(x). \quad (6.7.2)$$

Deze is eenvoudig terug te brengen tot (6.7.1), immers stel $y = u \cdot v$, u en v functies van x , dan is (6.7.2) te schrijven als

$$u''v + u'(2v' + fv) + u(v'' + fv' + gv) = h. \quad (6.7.3)$$

Kies nu v zo, dat $2v' = -fv$, dan volgt

$$v = Ce^{-\int f dx} \quad \text{en wegens}$$

$$v'' = -\frac{1}{2}(f'v + fv') + \frac{1}{4}f^2v - \frac{1}{2}f'v \quad \text{gaat (6.7.3) over in}$$

$$u'' + u(g - \frac{1}{4}f^2 - \frac{1}{2}f') = \frac{h}{v}, \quad \text{wat van de vorm (6.7.1) is, daar}$$

u' niet meer voorkomt.

Iets algemener is

$$y'' = f(x, y, y'), \quad (6.7.4)$$

die opgelost kan worden door de d.v. te vervangen door het stelsel

$$\begin{cases} z' = f(x, y, z) \\ y' = z \end{cases}$$

Om (6.7.1), waartoe we ons beperken, tot oplossing te brengen past men dubbele integratie toe.

Zij gegeven

$$\left. \begin{aligned} y'' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0 \\ y'(x_0) &= y'_0 \end{aligned} \right\} \quad (6.7.5)$$

Men kan dan aantonen

$$y_j = h^2 \left[\delta^{-2} f_j + \frac{1}{12} f_j - \frac{1}{240} \delta^2 f_j + \frac{31}{60480} \delta^4 f_j + \dots \right] \quad (6.7.6)$$

We moeten nu $\delta^{-2} f_0$ en $\delta^{-1} f_0$ nog vastleggen.

Er volgt

$$y_0 = h^2 \left[\delta^{-2} f_0 + \frac{1}{12} f_0 - \frac{1}{240} \delta^2 f_0 + \dots \right] \quad (6.7.7)$$

en

$$y'_0 = h \left[\mu \delta^{-1} f_0 - \frac{1}{12} \mu \delta f_0 + \frac{11}{720} \mu \delta^3 f_0 + \dots \right] \quad (6.7.8)$$

waarbij $\mu \delta^{-1} f_0 = \delta^{-1} f_{-\frac{1}{2}} + \frac{f_0}{2}$.

Voeren we nog in $Q_j = h^2 f_j$, dan worden bovenstaande formules

$$y_j = \delta^{-2} Q_j + \frac{1}{12} Q_j - \frac{1}{240} \delta^2 Q_j + \frac{31}{60480} \delta^4 Q_j + \dots \quad (6.7.9)$$

terwijl

$$y_0 = \delta^{-2} Q_0 + \frac{1}{12} Q_0 - \frac{1}{240} \delta^2 Q_0 \dots \quad (6.7.10)$$

en $hy'_0 = \mu \delta^{-1} Q_0 - \frac{1}{12} \mu \delta Q_0 + \frac{11}{720} \mu \delta^3 Q_0 \dots \quad (6.7.11)$

Opmerking :

De algemene uitdrukking is

$$hy'_j = \mu \delta^{-1} Q_j - \frac{1}{12} \mu \delta Q_j + \frac{11}{720} \mu \delta^3 Q_j \dots \quad (6.7.12)$$

a) Reeksontwikkeling

Stel, dat y in een reeks te ontwikkelen is :

$$y = y_0 + hy'_0 + \frac{1}{2!} h^2 y''_0 + \dots$$

Bepaal een aantal functiewaarden en hun eerste afgeleiden. Hieruit volgen dan de bijbehorende waarden van Q en hun differenties.

Uit (6.7.9) bepalen we $\delta^{-2} Q_j$.

Voorbeeld :

$$y'' + xy = 0$$

$$y(0) = 1$$

$$y'(0) = 0.$$

Reeksontwikkeling geeft de oplossing

$$y = 1 - \frac{x^3}{3!} + \frac{4}{6!} x^6 - \frac{1 \cdot 4 \cdot 7}{9!} x^9 \dots \quad (6.7.13)$$

en $y' = -\frac{x^2}{2!} + \frac{4}{5!} x^5 - \frac{1 \cdot 4 \cdot 7}{8!} x^8 \dots$

We starten nu met $x = -0.3(.1)0.3$ en berekenen met (6.7.13)

$$y_{-3}, \text{ tot } y_3, \text{ en } y'_{-3}, \text{ tot } y'_3.$$

Daar nu ook Q_{-3} tot Q_3 bekend zijn, kunnen we met (6.7.9) $\delta^{-2}Q_j$ berekenen en hiermee $\delta^{-1}Q_{j-\frac{1}{2}}$, daar de eerste somfuncties differenties van de tweede somfuncties zijn. Als controle zijn $\delta^{-1}Q_{j-\frac{1}{2}}$ te vinden uit (6.7.12), immers deze kan geschreven worden als

$$\begin{aligned} hy'_j &= \delta^{-1}Q_{j-\frac{1}{2}} + \frac{Q_j}{2} - \frac{1}{12} \frac{\delta Q_{j+\frac{1}{2}} + \delta Q_{j-\frac{1}{2}}}{2} + \dots = \\ &= \delta^{-1}Q_{j-\frac{1}{2}} + \frac{Q_j}{2} - \frac{1}{24} (Q_{j+1} - Q_{j-1}) + \dots \end{aligned}$$

Het is natuurlijk weer noodzakelijk bij de start zeer nauwkeurig te werk te gaan. Neem dus h klein. Heeft men eenmaal de start, dan ken men met (6.7.9) verder. Met Q , $\delta^{-2}Q$ en $\delta^{-1}Q$ kan men dan de volgende waarden bepalen.

De start wordt (met Taylor)

x	y	$\delta^{-2}Q$	$\delta^{-1}Q$	Q	δQ	$\delta^2 Q$
-0.3	1.004504	1.004253		0.003014		
.2	1.001334	1.001167	-0.003086	0.002003	-0.001011	8
.1	1.000167	1.000083	-0.001083	0.001000	-0.001003	3
0.0	1.000000	1.000000	-0.000083	0.000000	-0.001000	0
.1	0.999833	0.999917	-0.001084	-0.001000	-0.000997	3
.2	0.998667	0.998833	-0.003088	-0.001997	-0.000990	7
.3	0.995496	0.995745	-0.006074	-0.002986		
.4		0.989671				

Er treden wegens afronding nog kleine verschillletjes op.

De integratie kan nu beginnen.

We kennen $\delta^{-2}Q_{j+1}$, maar Q_{j+1} en δ^2Q_{j+1} nog niet. We schatten deze, wat bij een gladde differentietabel wel kan en daarmee berekenen we y_{j+1} , hieruit Q_{j+1} en de daaruit volgende teruglopende differenties. Is Q_{j+1} veel verschillend van de schatting, dan berekent men y_{j+1} opnieuw. Het behoeft geen betoog, dat men h zo klein moet kiezen, dat y direct

goed is. Men zorgt er dus voor dat $\delta^3 Q$ al geen invloed meer heeft. Er volgt op deze wijze :

TABEL X

x	y	$\delta^{-2} Q$	$\delta^{-1} Q$	Q	δQ	$\delta^2 Q$
0	1.	1.00000	- 8	- 0	-100	
.1	0.99983	0.99992	- 108	-100	-100	0
.2	.99867	.99884	- 308	-200	- 99	1
.3	.99550	.99576	- 608	-299	- 97	2
.4	.98934	.98968	-1004	-396	- 94	3
.5	.97923	.97964	-1494	-490	- 89	5
.6	.96422	.96470	-2073	-579	- 85	4
.7		.94397		-664		
	enz.					geschat

b) Iteratie

Neem als benadering $y(x_0+h) = y_0 + y'_0 h$ en bepaal y en Q voor een aantal basispunten.

Met (6.7.10) bepaalt men met y_0 : $\delta^{-2} Q_0$ en met (6.7.11) : $\delta^{-1} Q_{-\frac{1}{2}}$ en bouwt de tabel op.

Daarna gaat men verder met (6.7.9), men vindt dan een rij nieuwe y-waarden.

Bepaal weer Q, $\delta^{-2} Q$ en $\delta^{-1} Q$, tot het geheel stabiel is.

We beschouwen nu hetzelfde voorbeeld en starten met beginschatting :

$y = 1$, bepaal Q, de differenties en de somfuncties.

Er volgt dan

TABEL XI

x	y	$\delta^{-2} Q$	$\delta^{-1} Q$	Q	δQ	$\delta^2 Q$
-0.3	1.000000	1.004249	-3083	3000	-1000	
-.2	1.000000	.001166	-1083	2000	-1000	0
.1	1.000000	.000083	- 83	1000	-1000	0
0	1.000000	.000000	- 83	0	-1000	0
.1	1.000000	0.999917	-1083	-1000	-1000	0
.2	1.000000	.998834	-3083	-2000	-1000	0
.3	1.000000	.995751		-3000		

Bepaal nu de nieuwe y met (6.7.9). We vinden :

TABEL XII

x	y	$\delta^{-2}Q$	$\delta^{-1}Q$	Q	δQ	δ^2Q
-0.3	1.00450	1.004252	-3086	3014	-1011	
.2	1.00133	.001166	-1083	2003	-1003	8
.1	1.00017	.000083	- 83	1000	-1000	3
.0	1.00000	1.000000	- 83	0	-1000	0
+ .1	0.99983	0.999917	-1083	-1000	-1997	3
.2	0.99867	0.998834	-3080	-1997	- 990	7
.3	0.99550	0.995754		-2987		

wat in overeenstemming is met de start bij methode a).

Opmerking :

a) De exacte oplossing der gegeven D.V. is

$$3^{-\frac{1}{3}} \Gamma\left(\frac{2}{3}\right) \sqrt{x} J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}}\right), \quad \text{waarbij } J_{-\frac{1}{3}} \text{ een getabelleerde}$$

Besselfunctie is.

b) Met de gevonden y -waarden in tabel XII kan men Q weer bepalen, de tabel verder opbouwen, en daaruit opnieuw de y 's, net zolang tot geen verandering meer optreedt.

8. Tweepuntsrandvoorwaarden

In § 7 hebben we de d.v. van de 2e orde behandeld, waarbij de initiaalvoorwaarden zijn gegeven in één punt :

$$y(a) = A \quad ; \quad y'(a) = C.$$

Het komt echter vaak voor, dat gegeven is :

$$y(a) = A \quad ; \quad y(b) = B.$$

In § 7 zagen we, dat $y'' + u(x)y' + v(x)y = w(x)$ getransformeerd kan worden tot

$$y'' + f(x)y = g(x). \quad (6.8.1)$$

We gebruiken als de formule :

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = h^2(y_n'' + \frac{1}{12} \delta^2 y_n'') + O(h^6) \quad (6.8.2)$$

Deze formule is direct uit (6.7.9) af te leiden. Vervangen we nu y_n'' door $g_n - f_n y_n$, wegens (6.8.1), dan wordt (6.8.2), als we $O(h^6)$ verder verwaarlozen :

$$\begin{aligned} & (1 + \frac{h^2}{12} f_{n+1}) y_{n+1} - 2(1 - \frac{5}{12} h^2 f_n) y_n + \\ & + (1 + \frac{h^2}{12} f_{n-1}) y_{n-1} = \frac{h^2}{12} (g_{n+1} + 10g_n + g_{n-1}). \end{aligned} \quad (6.8.3)$$

Verdeel nu het vak (a, b) in $N + 1$ gelijke delen, zodat

$$x_0 = a, x_1 = a + h, \dots, x_N = a + Nh, x_{N+1} = b; h = \frac{b-a}{N+1}.$$

We krijgen dan door substitutie een stelsel lineaire vergelijkingen in y_1, \dots, y_N van de gedaante

$$\begin{aligned} (1 + \frac{h^2}{12} f_0) y_0 &= 2(1 - \frac{5}{12} h^2 f_1) y_1 + (1 + \frac{h^2}{12} f_2) y_2 = &= \frac{h^2}{12} G_1 \\ (1 + \frac{h^2}{12} f_1) y_1 &- 2(1 - \frac{5}{12} h^2 f_2) y_2 + (1 + \frac{h^2}{12} f_3) y_3 = \frac{h^2}{12} G_2 \\ &\dots \\ (1 + \frac{h^2}{12} f_{N-1}) y_{N-1} &- 2(1 - \frac{5}{12} h^2 f_N) y_N + \\ &+ (1 + \frac{h^2}{12} f_{N+1}) y_{N+1} = \frac{h^2}{12} G_N. \end{aligned} \quad (6.8.4)$$

waarbij $G_k = \varepsilon_{k+1} + 10\varepsilon_k + \varepsilon_{k-1}$,

terwijl $y_0 = A$ en $y_{N+1} = B$, waaruit

y_1, \dots, y_n kunnen worden opgelost.

De oplossing is vrij simpel, daar de matrix van het stelsel (6.8.4) er als volgt uitziet :

$$A_N = \{a_{ik}\} ; \quad a_{ik} = 0 \quad k \neq i-1, i, i+1 \\ 0(1) \leq (i,k) \leq N-1$$

terwijl de andere termen bekend zijn.

Op de bekende manier kunnen de onbekende y-waarden dus gevonden worden.

Opmerking :

Het kan natuurlijk voorkomen, dat de gegeven d.v. in het rechterlid ook nog een factor y bevat.

Is deze van hogere graad dan de eerste, dan kan men eerst net doen of het stelsel wel lineair is en gaat dan iteratief verder, d.w.z. gebruik een oplossing om een nieuw rechterlid te bepalen, los het stelsel weer op en bereken opnieuw de rechterleden net zo lang tot er geen verandering meer optreedt in het gewenste aantal decimalen.

9. Partiële differentiaalvergelijkingen

Bij een partiële d.v. treden de functies $u(x,y)$, $\frac{\partial u}{\partial x}$, $\frac{\partial u}{\partial y}$ en de hogere afgeleiden van $u(x,y)$ op.

Een partiële d.v. is een vergelijking, die het verband aangeeft tussen de bovengenoemde functies, wat geschreven kan worden, als we niet verder gaan dan afgeleiden van de tweede orde als

$$\Phi\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u, x, y\right) = 0.$$

We bespreken een eenvoudig voorbeeld

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \quad (\text{Laplace}) \quad (6.9.1)$$

We zetten deze vergelijking eerst om in een differentievergelijking.

We definiëren :

$$I : \begin{cases} u_x = \frac{u(x+h,y) - u(x,y)}{h} \\ u_x^- = \frac{u(x,y) - u(x-h,y)}{h} \\ u_y = \frac{u(x,y+h) - u(x,y)}{h} \\ u_y^- = \frac{u(x,y) - u(x,y-h)}{h} \end{cases} \quad (6.9.2)$$

$$II: \begin{cases} u_{xx}^- = \frac{u_x - u_x^-}{h} = \frac{u(x+h,y) - 2u(x,y) + u(x-h,y)}{h^2} \\ u_{yy}^- = \frac{u_y - u_y^-}{h} = \frac{u(x,y+h) - 2u(x,y) + u(x,y-h)}{h^2} \end{cases} \quad (6.9.3)$$

Op de volgende manier kan men de functiewaarden bepalen in een netwerk van punten. Willen we het netwerk fijner hebben, dan verkleinen we h .

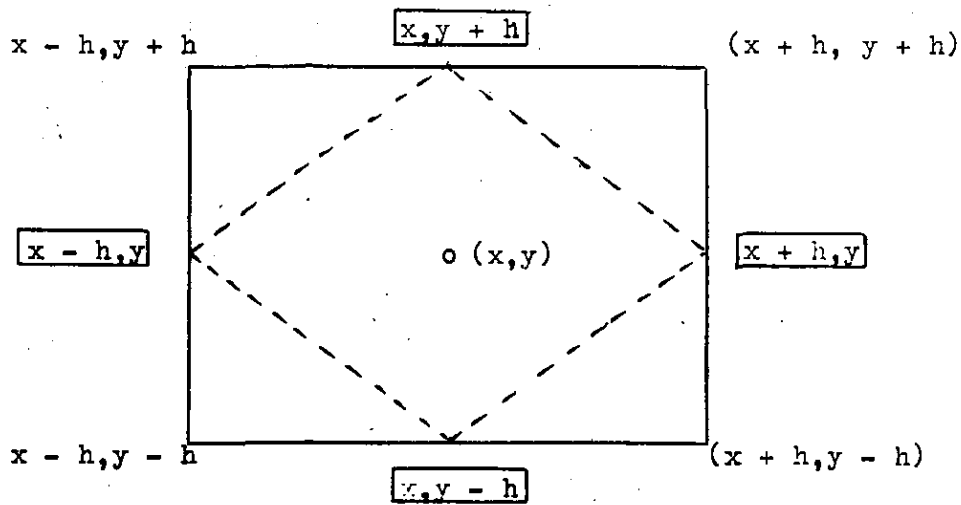
Met (6.9.3) kan men (6.9.1) benaderd als volgt schrijven

$$\begin{aligned} u(x+h,y) - 2u(x,y) + u(x-h,y) + u(x,y+h) - \\ - 2u(x,y) + u(x,y-h) = 0. \end{aligned} \quad (6.9.4)$$

Oplossen van $u(x,y)$ geeft

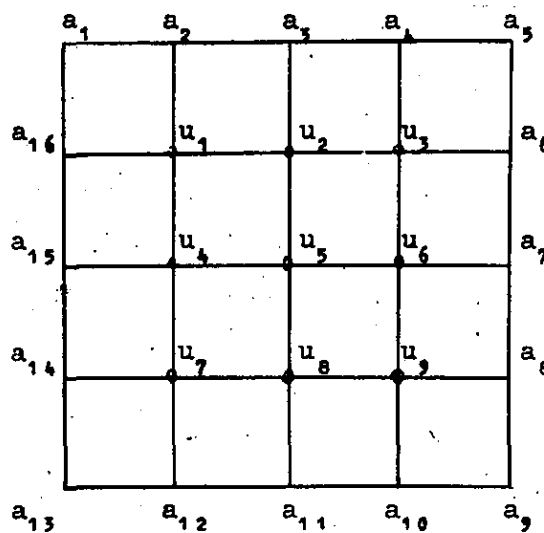
$$u(x,y) = \frac{1}{4} \{ u(x+h,y) + u(x,y+h) + u(x-h,y) + u(x,y-h) \} \quad (6.9.5)$$

We zien hieruit dat de functiewaarde van $u(x,y)$ binnen een vierkant bepaald door de punten $(x,y-h)$; $(x+h,y)$; $(x,y+h)$; $(x-h,y)$ benaderd wordt door het rekenkundig gemiddelde van de functiewaarden in de hoekpunten rond dit punt gelegen, volgens fig.I. :



We tekenen nu een netwerk van kleine vierkanten en nemen aan, dat de gegeven randwaarden van $u(x,y)$ genoteerd worden door a_i . Het netwerk is getekend in

fig. II



De eerste benaderingen van de inwendige punten u_i worden nu gevonden uit (zie figuur II) :

$$\begin{array}{l}
 u_5 = \frac{1}{4}(a_3 + a_7 + a_{11} + a_{15}) \\
 u_1 = \frac{1}{4}(u_5 + a_{15} + a_1 + a_3) \\
 u_3 = \frac{1}{4}(u_5 + a_7 + a_3 + a_5) \\
 u_7 = \frac{1}{4}(u_5 + a_{11} + a_{13} + a_{15}) \\
 u_9 = \frac{1}{4}(u_5 + a_7 + a_9 + a_{11})
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 u_2 = \frac{1}{4}(u_5 + a_3 + u_1 + u_5) \\
 u_4 = \frac{1}{4}(u_1 + u_5 + u_7 + a_{15}) \\
 u_6 = \frac{1}{4}(a_7 + u_9 + u_5 + u_3) \\
 u_8 = \frac{1}{4}(u_9 + a_{11} + u_7 + u_5)
 \end{array}
 \quad (6.9.6)$$

Zoals blijkt, worden u_5, u_2, u_1, u_6 en u_8 bepaald uit het schema zoals in fig. I te voorschijn komt uit de stippellijnen, u_1, u_3, u_7 en u_9 uit de getrokken lijnen in die figuur. Daar we met een eerste benadering hebben te maken, is dit geen bezwaar.

In de volgende stappen gaan we wel volgens de stippellijnen uit figuur I te werk.

De tweede benadering wordt nu zodanig, dat we de pas gevormde nieuwe waarden voor een zekere u_j direct in de volgende berekening substitueren. Op die manier ontstaat een successieve benadering van het probleem (iteratief proces).

Er komt het volgende schema voor de tweede stap

$$\left. \begin{aligned} {}_2 u_1 &= \frac{1}{4}(u_2 + a_2 + a_{16} + u_4) \\ {}_2 u_2 &= \frac{1}{4}(u_3 + a_3 + {}_2 u_1 + u_5) \\ {}_2 u_3 &= \frac{1}{4}(a_6 + a_4 + {}_2 u_2 + u_6) \\ {}_2 u_4 &= \frac{1}{4}(u_5 + {}_2 u_1 + a_{15} + u_7) \\ {}_2 u_5 &= \frac{1}{4}(u_6 + u_8 + {}_2 u_4 + {}_2 u_2) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} {}_2 u_6 &= \frac{1}{4}(a_7 + {}_2 u_3 + {}_2 u_5 + u_9) \\ {}_2 u_7 &= \frac{1}{4}(u_8 + a_{12} + a_{14} + {}_2 u_4) \\ {}_2 u_8 &= \frac{1}{4}(u_9 + a_{11} + {}_2 u_7 + {}_2 u_5) \\ {}_2 u_9 &= \frac{1}{4}(a_8 + a_{10} + {}_2 u_8 + {}_2 u_6) \end{aligned}$$

enz.

(6.9.7)

Toepassing :

Los op $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$, als

$$\begin{cases} u(0,y) = 0 \\ u(x,0) = \frac{1}{2}x^2 \\ u(4,y) = 8 + 2y \\ u(x,4) = x^2. \end{cases}$$

We nemen als netwerk, dat dus nog verfijnd kan worden ($x, y = 0, 1, 2, 3, 4$) $h = 1$.

De randwaarden worden in deze punten berekend en rondom geplaatst.

De berekening wordt volgens (6.9.6) en (6.9.7) uitgevoerd en er volgt

TABEL XIII (zie blz. 127)

Opmerkingen :

- 1) De berekening, die hier is uitgevoerd in een nauwkeurigheid van 4 decimalen, wordt zover voortgezet, tot geen verandering meer optreedt. Dit is hier bereikt na 10 achtereenvolgende stappen, volgens het systeem der formules (6.9.6) en (6.9.7).
- 2) Door de stappen kleiner te maken, krijgt men een fijner netwerk en een snellere iteratie.
- 3) In sommige gevallen is het mogelijk een partiële d.v. zoals (6.9.1) op te lossen met scheiding van variabelen. Dit kan tot een eenvoudige berekening leiden, als de randvoorwaarden geschikt zijn.

In ons voorbeeld is dit niet het geval.
 Het scheiden van variabelen gaat als volgt.

Men stelt $u(x,y) = f(x) g(y)$, dan wordt (6.9.1)

$$f''(x) g(y) + f(x) g''(y) = 0 \implies \begin{aligned} f''(x) &= -k^2 f(x) \\ g''(y) &= k^2 g(y) \end{aligned}, \quad k \text{ constant.}$$

Zijn de randvoorwaarden geschikt, dan is hieruit de oplossing te vinden.
 We gaan daar niet verder op in.

TABEL XIII

$x \backslash y$	0	1	2	3	4
0	0	0.5	2	4.5	8
1	0	1.6250 .5625 .5547 .5640 ⋮ .5670	3.6875 .6719 .6982 .7088 ⋮ .7054	6.6250 .5586 .5722 .5698 ⋮ .5670	10
2	0	2.0625 .0469 .0576 .0658 ⋮ .0626	4.5000 .6797 .6992 .6931 ⋮ .6876	8.0625 .0908 .0704 .0656 ⋮ .0626	12
3	0	2.1250 1.9961 2.0002 1.9983 ⋮ 1.9956	4.9375 .9502 .9274 .9227 ⋮ .9197	9.1250 .0102 8.9994 .9971 ⋮ .9956	14
4	0	1.0	4.0	9.0	16