TECHNISCHE HOGESCHOOL EINDHOVEN
Afdeling Algemene Wetenschappen
Onderafdeling der Wiskunde

Cursus

Wetenschappelijk Rekenaar A

te Eindhoven

(Theorie en Opgaven)

Najaarssemester 1974

Inhoudsbeschrijving

Cursus Wetenschappelijk Rekenenaar te Eindhoven (Theorie en Opgaven)

najaarssemester 1974

JdG, 15 December 2005

CURSUS WETENSCHAPPELIJK REKENAAR A TE EINDHOVEN

Rooster van de 15e cursus - najaarssemester 1974.

Het najaarssemester loopt van 19-8-1974 t/m 21-12-1974 èn van 2-1-75 t/m 4-1-75.
Docenten: Geurts, Jansen, Post/van Rooij.

Studieschema

docenten	maandag Post/van Rooij	dinsdag Jansen	donderdag Geurts
week beginnend			
19-8	th. WSK 20, incl. oef.	ALGOL (gramm.)	Integreren (th.)
26-8	" "	" "	" "
2-9	" "	" "	" "
9-9	" "	Integreren (oef.)	" "
16-9	" "	" "	Differentiëren (th.)
23-9	" "	" "	Diff.vgl. (th.)
30-9	" "	" "	" "
7-10	" "	Differentiëren (oef.)	" "
14-10	" "	Programmeren (th.)	" (oef.)
21-10	" "	" "	" "
28-10	" "	" "	" (th.)
4-11	" "	" "	" "
11-11	" "	Num.opl. D.V. (oef.)	" "
18-11	" "	" " "	" "
25-11	Programmeren	" " "	" "
2-12	"	" " "	" "
9-12	"	Programmeren (oef.)	" (oef.)
16-12	"	Tentamen Prog. gram.	" "
2-1	h e r h a l i n g w i s k u n d e 2 0		

N.B. Theorielessen Programmeren en Numerieke Analyse in zaal 8 auditorium.
Oefeningen Programmeren en Numerieke Analyse in zaal 19 transitorium.
Lessen (theorie en oefeningen Wiskunde 20) in zaal 8 auditorium.

Tentamens: Programmeren grammaticaal : dinsdag 17-12-1974
Wiskunde 20 : maandag 13-1-1975, 9.00-12.00 uur
Numerieke Analyse Ib : donderdag 9-1-1975
Programmeren algoritmisch : donderdag 16-1-1975

0. Algemene inleiding

De numerieke wiskunde houdt zich bezig met het onderzoek naar efficiënte methoden om de oplossing van een wiskundig probleem te geven in de vorm van een getal, c.q. een aantal getallen. Globaal zijn er twee specifieke numerieke moeilijkheden:

1) de berekening van een oplossing moet in een eindige tijd gebeuren,
2) de berekening moet met een zekere nauwkeurigheid gebeuren.

Ad 1). Stel we willen de determinant van een $n \times n$-matrix berekenen. Door ontwikkelen naar de eerste rij herleiden we de berekening van de $n \times n$ determinant tot het berekenen van n $(n-1) \times (n-1)$ determinanten, etc. In formule:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i-1} a_{1i} \begin{vmatrix} a_{21} & \cdots & a_{2,i-1} & a_{2,i+1} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & & & & \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,i-1} & a_{n,i+1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

We schatten de tijdsduur van de berekening door het aantal vermenigvuldigingen te schatten.
Stel $f(n)$ is het aantal vermenigvuldigingen nodig voor het berekenen van de $n \times n$ determinant, dan geldt $f(n) = nf(n-1) + n$ en $f(2) = 2$.
Hieruit volgt gemakkelijk $f(n) > n!$. Neem nu bv. $n = 20$, dan is $f(20) > 20! \approx 2.4 \times 10^{17}$.
Bij een machine met een vermenigvuldigingstijd van 20 μ sec, kost de berekening meer dan 0.5×10^{13} sec $\approx 2 \times 10^{5}$ jaar.

Ad 2). Er moet met afgeronde getallen gewerkt worden, bv. 12 decimale cijfers of 40 binaire cijfers. Na iedere bewerking wordt opnieuw afgerond.

Ad 1) en 2). Een oneindig wiskundig proces moet worden afgebroken (ad 1)) als de oplossing voldoende nauwkeurig bekend is (ad 2)).

Voorbeeld. Het sommeren van een oneindige reeks

$$\frac{\pi}{4} = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \dots .$$

Bij de beoordeling van een numerieke oplossingsmethode wordt gelet op de volgende criteria:

1) Is de methode snel en zijn de berekeningen eenvoudig en overzichtelijk?
2) Is de nauwkeurigheid van het resultaat te regelen, c.q. is een uitspraak mogelijk over de nauwkeurigheid?
3) Is het mogelijk eenvoudige controle berekeningen uit te voeren ter bestrijding van fouten?

We voeren nu een aantal begrippen in.
Zij a een benadering voor het getal $\bar{a}$.
De absolute fout in a is Δa als $a = \bar{a} + \Delta a$.
De relatieve fout in a is δa als $\frac{a - \bar{a}}{\bar{a}} = \delta a$ ofwel $a = \bar{a}(1 + \delta a)$.
Als a een decimaal getal is, dan kunnen we a schrijven als $a = m \times 10^p$, met $0.1 \leq m < 1$.
m heet de mantisse van a.
Onderstel nu $a = m \times 10^p$ en $\bar{a} = \bar{m} \times 10^p$.
We zeggen a heeft als benadering voor $\bar{a}$ k significante cijfers als $|m - \bar{m}| \sim 10^{-k}$.
We zeggen a heeft als benadering voor $\bar{a}$ k significante decimalen als $|a - \bar{a}| \sim 10^{-k}$.

Als a als benadering voor $\bar{a}$ k significante cijfers heeft dan geldt $|\delta a| \sim 10^{-k}$.
Als a als benadering voor $\bar{a}$ k significante decimalen heeft dan geldt $|\Delta a| \sim 10^{-k}$. (Ga dit na!)

Voorbeeld. $\bar{a} = 13.6854$, $a = 13.253$.
a heeft 2 significante cijfers en 0 significante decimalen.
$\bar{a} = 0.381 \times 10^{-6}$, $a = 0.3153 \times 10^{-6}$.
a heeft 1 significant cijfer en 7 significante decimalen.

De regels voor de foutenvoortplanting bij de elementaire bewerkingen zijn de volgende.
Zij de te berekenen grootheid

$$\bar{c} = \bar{a} \times \bar{b} .$$

De ter beschikking staande benadering voor $\bar{c}$ is

$$c = a \times b = \bar{a}(1 + \delta a)\bar{b}(1 + \delta b) \approx \bar{a}\bar{b}(1 + \delta a + \delta b)$$

dus

$$\delta c \approx \delta a + \delta b .$$

We hebben dus de volgende vuistregel:
Als het getal a een relatieve fout δa heeft en het getal b een relatieve fout δb, dan heeft $a \times b$ een relatieve fout ongeveer gelijk aan $\delta a + \delta b$.
Als het getal a n significante cijfers heeft en het getal b m significante cijfers, dan heeft $a \times b$ een aantal significante cijfers ongeveer gelijk aan $\min(m,n)$.

Opgave. Formuleer soortgelijke uitspraken voor de bewerkingen delen, optellen en aftrekken.

Tot slot van deze inleiding nog een voorbeeld waaruit blijkt hoe we een numeriek probleem goed en slecht kunnen aanpakken.

Probleem. Bereken de in absolute waarde kleinste wortel van de vergelijking $x^2 - 2bx + c = 0$ met $b > 0$.

Wiskundige oplossing: $x = b - \sqrt{b^2 - c}$.

Numeriek is hiermee het probleem niet opgelost, integendeel het begint pas.

1) Hoe moet $\sqrt{a}$ berekend worden bij gegeven a.
Een goed proces is $x_0 = 1$, $x_{n+1} = \frac{1}{2}\left[x_n + \frac{a}{x_n}\right]$.
Later wordt bewezen dat de absolute fout in x_{n+1} ongeveer het kwadraat is van de absolute fout in x_n. Daaruit is duidelijk dat het proces kan worden beëindigd als $|x_{n+1} - x_n|$ kleiner is dan de gewenste absolute nauwkeurigheid.

2) Hoe nauwkeurig kan $\sqrt{a}$ berekend worden als de relatieve nauwkeurigheid van a ε is.
Stel $a = \bar{a}(1 + \varepsilon)$, dan $\sqrt{a} = \sqrt{\bar{a}}(1 + \varepsilon)^{\frac{1}{2}} \approx \sqrt{\bar{a}}(1 + \frac{1}{2}\varepsilon + \ldots)$, dus de relatieve nauwkeurigheid in $\sqrt{a}$ is ongeveer $\frac{1}{2}\varepsilon$.

3) Hoe nauwkeurig is de gegeven oplossing bij gegeven (onnauwkeurige) waarden van b en c.
Dit kan erg tegenvallen door cijferverlies!
Stel bijvoorbeeld: rekenwerk in machine met 6 cijfers, $b = 1000$, $c = -1$.
Kleinste wortel: $1000 - \sqrt{10^6 + 1} = 1000 - \sqrt{10^6} = 0$, aangenomen $\sqrt{10^6}$ is exact berekend. Dus geen enkele relatieve nauwkeurigheid.

4) Is er een betere (numerieke) oplossing.
Ja, $x = \dfrac{c}{b + \sqrt{b^2 - c}}$. In deze formule treedt geen verlies van relatieve

nauwkeurigheid (cijferverlies) op.

<u>Voorbeeld</u>. b = 1000, c = -1 $\Rightarrow x = \dfrac{-1}{1000 + \sqrt{10^6}} = -\dfrac{1}{2000}$.

Deze oplossing is in 6 significante cijfers nauwkeurig.

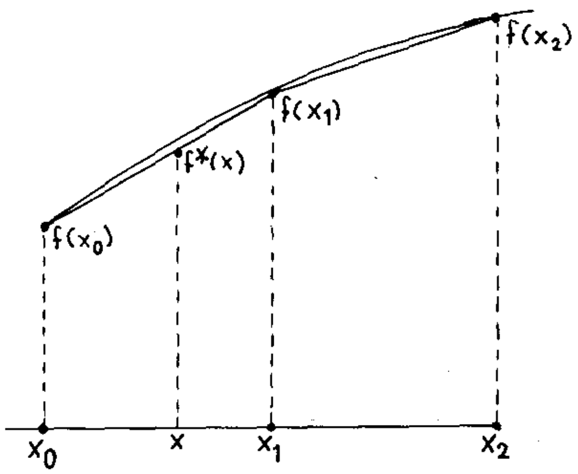
Hoofdstuk I. Interpolatie bij ongelijke intervallen

1. Inleiding. Lineaire interpolatie

Stel gegeven is de volgende tabel:

x	log(x)
2.00	0.69314718
2.01	0.69813472
2.02	0.70309751
2.03	0.70803579
2.04	0.71294981
2.05	0.71783979

Gevraagd wordt om met behulp van deze tabel log(2.0115) te benaderen en zo mogelijk een schatting te geven van de onnauwkeurigheid van de benadering. Een mogelijkheid om een benadering te berekenen is de volgende. Gebruik als benadering voor de functie een gebroken rechte lijn door de opgegeven punten. Dit heet lineaire interpolatie.



In formule:

$$f^*(x) = f(x_0) + (x - x_0)\,\frac{(f(x_1) - f(x_0))}{(x_1 - x_0)}\,, \qquad (1.1.1)$$

ofwel

$$f^*(x) = \frac{(x_1 - x)}{(x_1 - x_0)}\,f(x_0) + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}\,f(x_1)\,. \qquad (1.1.2)$$

Dus

$$f^*(2.0115) = 0.85 \times 0.69813472 + 0.15 \times 0.70309751 = 0.6988791385\,.$$

Stel nu

$$f(x) = f^*(x) + R(x) \ . \tag{1.1.3}$$

$R(x)$ is de absolute fout in $f^*(x)$, genaamd restterm of afbreekfout. Is er iets te zeggen over de grootte van $R(x)$?

$$R(x) = f(x) - f^*(x) =$$

$$= \frac{(x_1 - x)}{(x_1 - x_0)} (f(x) - f(x_0)) + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)} (f(x) - f(x_1)) \ . \tag{1.1.4}$$

Als f tweemaal differentieerbaar is met continue tweede afgeleide, dan volgt hieruit

$$R(x) = \tfrac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)\left[\frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} f''(\xi_0) + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)} f''(\xi_1)\right] \tag{1.1.5}$$

met $x_0 < \xi_0 < x$ en $x < \xi_1 < x_1$.
(Ga dit na door op $f(x_0)$ en $f(x_1)$ in (1.1.4) de formule van Taylor toe te passen rond x.)

Omdat f" continu is en $\dfrac{x_1 - x}{x_1 - x_0} f''(\xi_0) + \dfrac{x - x_0}{x_1 - x_0} f''(\xi_1)$ een gewogen gemiddelde is van $f''(\xi_0)$ en $f''(\xi_1)$, volgt dat er een ξ is met $\xi_0 < \xi < \xi_1$, zodanig dat

$$R(x) = \tfrac{1}{2}(x - x_0)(x - x_1)f''(\xi) \ . \tag{1.1.6}$$

In bovenstaand geval is

$$R(2.0115) = 0.5 \times 0.0015 \times (-0.0085) \times \left(-\frac{1}{\xi^2}\right)$$

en dus

$$|R(2.0115)| \leq 0.5 \times 0.0015 \times 0.0085 \times 0.25 \approx 0.00000159 \ .$$

Een andere fout wordt veroorzaakt door de onnauwkeurigheid van log(x) in de tabel.
Veronderstel de opgegeven getallen zijn correcte afrondingen, dus bevatten een absolute fout maximaal 0.5×10^{-8}. Tengevolge daarvan bevat log(2.0115) een fout, die kleiner is dan $0.85 \times 0.5 \times 10^{-8} + 0.15 \times 0.5 \times 10^{-8} = 0.5 \times 10^{-8}$.
Deze fout heet afrondingsfout.

2. Formule van Lagrange

We beschouwen het volgende probleem. Zij van een functie $f(x)$ $n+1$ functiewaarden $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$ gegeven. We vragen ons af of het mogelijk is een polynoom $f^*(x)$ te vinden zodanig dat $f^*(x_i) = f(x_i)$ voor $i = 0,1,\ldots,n$. Het antwoord op deze vraag hangt af van de beperkingen die we stellen aan de graad van het polynoom. Eisen we dat de graad van het polynoom hoogstens n mag zijn, dan is er hoogstens één oplossing.
Immers, stel $f^*(x)$ en $g^*(x)$ voldoen beide, dan geldt $f^*(x) - g^*(x)$ is een polynoom van hoogstens de graad n met $n+1$ nulpunten $x_0, x_1, \ldots, x_n$ en dus is $f^*(x) - g^*(x)$ identiek nul.
Ook geldt dat er een polynoom $f^*(x)$ van hoogstens de graad n bestaat. Definieer nl. de polynomen $L_k(x)$ voor $k = 0,1,\ldots,n$ als volgt:

$$L_k(x) := \frac{(x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \ldots (x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1) \ldots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \ldots (x_k - x_n)}$$

of

$$L_k(x) := \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)} . \qquad (1.2.1)$$

Nu geldt $L_k(x)$ is een polynoom van graad n met

$$L_k(x_j) = \begin{cases} 0 \text{ als } j \neq k \\ 1 \text{ als } j = k \end{cases} , \qquad (1.2.2)$$

en hieruit volgt direct

$$f^*(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + \ldots + L_n(x)f(x_n)$$

of

$$f^*(x) = \sum_{k=0}^{n} L_k(x)f(x_k) . \qquad (1.2.3)$$

We noemen de polynomen $L_k(x)$ de Lagrangecoëfficiënten en het polynoom $f^*(x)$ uit (1.2.3) het interpolatiepolynoom van Lagrange.

Voorbeeld 1. Bepaal het interpolatiepolynoom bij de volgende gegevens:

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

$$f^*(x) = \frac{x(x-1)(x-2)}{(-1)(-2)(-3)}\,1 + \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(1)(-1)(-2)}\,1 +$$

$$+ \frac{(x+1)(x)(x-1)}{(2)(1)(-1)}\,1 + \frac{(x+1)(x)(x-2)}{(3)(2)(1)}\,(-5) = -x^3 + x + 1 .$$

We vragen ons nu af of er iets te zeggen is over het verschil tussen $f(x)$ en $f^*(x)$ als $x \neq x_i$, of als

$$f(x) = f^*(x) + R_{n+1}(x) , \tag{1.2.4}$$

wat kunnen we dan zeggen over $R_{n+1}(x)$. Als f een "wilde" functie is, is hier niets van te zeggen. Wel als we iets weten over de afgeleiden van f.

Stelling. Zij f een n+1 maal differentieerbare functie in het interval (a,b), dat de punten $x,x_0,x_1,\ldots,x_n$ bevat. Dan is er een getal ξ_x met $\min(x,x_0,x_1,\ldots,x_n) < \xi_x < \max(x,x_0,x_1,\ldots,x_n)$ zodanig dat

$$f(x) = f^*(x) + L(x)\,\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \tag{1.2.5}$$

met $L(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ \ldots\ (x - x_n)$.

Bewijs. Zij $x \in (a,b)$ en $x \neq x_i$. Als $x = x_i$ dan is de stelling triviaal. Definieer het getal $c(x)$ door

$$f(x) = f^*(x) + c(x)L(x) .$$

Beschouw de functie

$$F(t) = f(t) - f^*(t) - c(x)L(t) .$$

Er geldt dat $F(t)$ n+2 verschillende nulpunten heeft, nl. in $t = x$, $t = x_0$, $t = x_1,\ldots,t = x_n$.

We gebruiken nu het theorema van Rolle:

Zij $g(t)$ continu in $[t_1,t_2]$ en differentieerbaar in (t_1,t_2) en zij bovendien $g(t_1) = g(t_2)$, dan geldt: er is een punt $\tau \in (t_1,t_2)$ zodanig dat $g'(\tau) = 0$.

Uit Rolle volgt dus dat $F'(t)$ minstens n+1 nulpunten in (a,b) heeft.
Toepassen van Rolle op $F'(t)$ levert (dit kan vanwege het gegeven):
$F''(t)$ heeft minstens n nulpunten in (a,b) etc.
Zo vinden we $F^{(n+1)}(t)$ heeft minstens één nulpunt. Noem dit punt ξ_x.
Nu geldt

$$F^{(n+1)}(t) = f^{(n+1)}(t) - c(x)(n+1)!$$

en dus (neem $t = \xi_x$)

$$c(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} .$$

Hieruit volgt de stelling.

Opmerkingen

1) We kunnen deze stelling alleen toepassen als de afgeleiden van f bekend zijn.
2) Formule (1.2.5) heet de interpolatieformule van Lagrange. Het verschil tussen $f(x)$ en $f^*(x)$, of $R_{n+1}(x)$, heet de restterm of afbreekfout.
3) Als $f(x)$ een polynoom van hoogstens de graad n is dan geldt natuurlijk $R_{n+1}(x) = 0$.
Bv. neem $f(x) = 1$, dan volgt uit (1.2.3)

$$\sum_{k=0}^{n} L_k(x) = 1 . \qquad (1.2.6)$$

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

In het algemeen zullen de functiewaarden, die gebruikt worden in het interpolatiepolynoom van Lagrange, slechts onnauwkeurig bekend zijn. Dan is $f^*(x)$ natuurlijk ook onnauwkeurig bekend. Stel we werken met $\tilde{f}(x_j) = f(x_j) + \varepsilon_j$ in plaats van met $f(x_j)$. Het resultaat voor $f^*(x)$ is dan $\tilde{f}^*(x) = f^*(x) + \delta f^*(x)$ met

$$\delta f^*(x) = \sum_{k=0}^{n} L_k(x)\varepsilon_k .$$

$\delta f^*(x)$ heet de afrondingsfout. Als geldt $\varepsilon = \max(|\varepsilon_j|)$ voor $j = 0,1,\ldots,n$ dan kunnen we de afrondingsfout bv. schatten met

$$|\delta f^*(x)| \le \varepsilon \sum_{k=0}^{n} |L_k(x)| \; . \qquad (1.2.7)$$

Voorbeeld 2. Zij gegeven de volgende tabel van log(x)

x	log(x)
0.2	-1.609438
.4	- .916291
.5	- .693147
.7	- .356675
.8	- .223144
1.0	0.000000
1.2	0.182322

Gevraagd wordt met behulp van de punten 0.4, 0.5, 0.7, 0.8 log(0.6) te berekenen en een schatting te geven van de afbreekfout en de afrondingsfout.

$$L_0(0.6) = -\frac{1}{6}\;,\; L_1(0.6) = \frac{2}{3}\;,\; L_2(0.6) = \frac{2}{3}\;,\; L_3(0.6) = -\frac{1}{6}\;.$$

Hieruit volgt $f^*(0.6) = -\ .509975$ (afgerond op 6 decimalen). De afbreekfout is nu

$$(0.2)(0.1)(-0.1)(-0.2)\,\frac{1}{4!}\left(-\frac{6}{\xi^4}\right)$$

met $0.4 < \xi < 0.8$.

In het ongunstigste geval (neem $\xi = 0.4$) geldt dus

$$|\text{afbreekfout}| \le \frac{1}{256} \approx 4 \times 10^{-3}\;.$$

Uit (1.2.7) volgt

$$|\text{afrondingsfout}| \le 0.5_{10}{-6}\left(\frac{5}{3}\right) \approx 0.8_{10}{-6}\;.$$

Dit is dus aanzienlijk minder dan de afbreekfout. In 6 decimalen geldt log(0.6) = - 0.510826.

Opgave. Ga na hoe nauwkeurig log(0.6) berekend kan worden als alle punten uit de gegeven tabel gebruikt worden.

Van praktisch standpunt bezien is de interpolatieformule van Lagrange erg onaantrekkelijk om de volgende redenen. Stel we willen een functiewaarde berekenen met een opgegeven nauwkeurigheid of zo nauwkeurig mogelijk als de gegeven tabel ons toelaat. In het gunstigste geval zijn de afgeleiden van de functie bekend en kunnen we dus de restterm schatten afhankelijk van het aantal gebruikte punten. Als de orde van het interpolatiepolynoom bekend is, dan nog is het rekenwerk aanzienlijk.

Als we niets weten over de afgeleiden van de functie dan zouden we om een indruk te krijgen van de fout de berekening twee of meerdere malen met interpolatiepolynomen van verschillende orde kunnen doen tot deze binnen de opgegeven tolerantie hetzelfde resultaat leveren. Om de orde van het polynoom één of meer te verhogen moeten we de berekening telkens helemaal opnieuw starten.

We behandelen daarom in § 4 en § 5 overzichtelijke algoritmen om het interpolatiepolynoom stapsgewijs op te bouwen, d.w.z. bij elke stap wordt een nieuw basispunt toegevoegd.

Bij de behandeling van deze algoritmen maken we gebruik van gedeelde differenties, die in de volgende paragraaf worden gedefinieerd.

3. Gedeelde differenties

Zij gegeven een tabel van f(x) in de punten $x_0, x_1, x_2, \ldots$. We definiëren nu

$$f[x_i] := f(x_i) \ ,$$

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

$f[x_j, x_{j+1}, \ldots, x_{j+n}]$ heet de n-de gedeelde differentie.

Voorbeeld 1

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

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

De gedeelde differenties kunnen als volgt overzichtelijk in een tabel worden gerangschikt.

$$
\begin{array}{lllll}
x_0 & f[x_0] & & & \\
 & & f[x_0,x_1] & & \\
x_1 & f[x_1] & & f[x_0,x_1,x_2] & \\
 & & f[x_1,x_2] & & f[x_0,x_1,x_2,x_3] \\
x_2 & f[x_2] & & f[x_1,x_2,x_3] & \\
 & & f[x_2,x_3] & & f[x_1,x_2,x_3,x_4] \\
x_3 & f[x_3] & & f[x_2,x_3,x_4] & \\
 & & f[x_3,x_4] & & \\
x_4 & f[x_4] & & &
\end{array}
$$

Voorbeeld 2

$$
\begin{array}{cccccc}
x & f(x) & & & & \\
0 & 0 & & & & \\
 & & 1 & & & \\
1 & 1 & & 5 & & \\
 & & 21 & & 1 & \\
4 & 64 & & 8 & & 0 \\
 & & 37 & & 1 & \\
3 & 27 & & \boxed{13} & & \\
 & & 63 & & & \\
6 & 216 & & & &
\end{array}
$$

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

$$f[4,3,6] = \frac{63 - 37}{6 - 4} = 13 .$$

De gedeelde differentie $f[x_0,x_1,\ldots,x_n]$ kan als volgt worden geschreven als lineaire combinatie van de functiewaarden $f(x_0),f(x_1),\ldots,f(x_n)$:

$$f[x_0,x_1,\ldots,x_n] = \sum_{i=0}^{n} c_i\, f(x_i) , \qquad (1.3.2)$$

waarin

$$c_i = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\ldots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\ldots(x_i - x_n)} .$$

Opgave. Bewijs deze formule.

Voorbeeld 3

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

Uit formule (1.3.2) blijkt dat $f[x_0,x_1,\ldots,x_n]$ onafhankelijk is van de volgorde waarin $x_0,\ldots,x_n$ worden genomen.

Voorbeeld 4

In voorbeeld 2 is berekend f[4,3,6] = 13. Bereken nu f[3,6,4].

$$f[6,4] = \frac{64 - 216}{4 - 6} = 76 \;, \quad f[3,6] = \frac{216 - 27}{6 - 3} = 63 \;,$$

$$f[3,6,4] = \frac{76 - 63}{4 - 3} = 13 \;.$$

Tussen de gedeelde differenties en de afgeleiden van een functie bestaat een nauw verband. Is f(x) differentieerbaar dan geldt volgens de middelwaarde-stelling:

$$f[x_0,x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f'(\xi) \;, \quad \text{met } \xi \text{ tussen } x_0 \text{ en } x_1 \;.$$

In het algemeen geldt de volgende

Stelling. Zij f een n maal differentieerbare functie in het interval (a,b) dat de punten $x_0,x_1,\ldots,x_n$ bevat. Dan is er een getal ξ met

$$\min(x_0,x_1,\ldots,x_n) < \xi < \max(x_0,x_1,\ldots,x_n)$$

zodanig dat

$$f[x_0,x_1,\ldots,x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi) \;. \tag{1.3.3}$$

Bewijs. Uit formule (1.3.2) volgt door x_0 door x te vervangen

$$f(x) = \left\{\prod_{k=1}^{n} (x - x_k)\right\} f[x,x_1,\ldots,x_n] + \left\{\prod_{k=2}^{n} \frac{(x - x_k)}{(x_1 - x_k)}\right\} f(x_1) + \ldots +$$

$$+ \left\{\prod_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{n} \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)}\right\} f(x_i) + \ldots + \left\{\prod_{k=1}^{n-1} \frac{(x - x_k)}{(x_n - x_k)}\right\} f(x_n) =$$

$$= \left\{\prod_{k=1}^{n} (x - x_k)\right\} f[x,x_1,\ldots,x_n] + f^*_{n-1}(x) \;.$$

Nu is $f^*_{n-1}(x)$ gelijk aan het interpolatiepolynoom van Lagrange op de steunpunten $x_1,x_2,\ldots,x_n$. Dus geldt ook dat

$$\left\{\prod_{k=1}^{n} (x - x_k)\right\} f[x,x_1,\ldots,x_n] = \left\{\prod_{k=1}^{n} (x - x_k)\right\} \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$$

met

$$\min(x,x_1,\dots,x_n) < \xi < \max(x,x_1,\dots,x_n) .$$

<u>Opgave</u>. Bewijs deze stelling rechtstreeks door de functie

$$\varphi(x) = f(x) - f^*_{n-1}(x) - \left\{\prod_{k=1}^{n} (x - x_k)\right\} f[x_0,x_1,\dots,x_n]$$

te beschouwen (vgl. het bewijs van de formule van Lagrange).

<u>Opmerking</u>. Uit het bewijs van de stelling volgt voor de afbreekfout $R_{n+1}(x)$ bij n-de graads interpolatie op de punten $x_0,x_1,\dots,x_n$:

$$R_{n+1}(x) = L(x)f[x,x_0,x_1,\dots,x_n] . \tag{1.3.4}$$

Een gevolg van formule (1.3.3) is dat als f(x) een polynoom is van de graad n, nl.

$$f(x) = a_0 + a_1\, x + \dots + a_n\, x^n ,$$

dan is $f[x_0,\dots,x_n] = a_n$ en alle hogere differenties zijn nul. (Vgl. voorbeeld 2 waar $f(x) = x^3$.)

Wat gebeurt er als er twee of meer basispunten samenvallen? Nu worden in formule (1.3.2) een aantal noemers nul en we moeten dus limieten nemen. Zo volgt direct uit (1.3.3):

$$f[\underbrace{x,x,\dots,x}_{n+1\ \text{maal}}] = \frac{1}{n!}\, f^n(x) . \tag{1.3.5}$$

<u>Voorbeeld 5</u>

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

Neem het 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		
			3		1	
x_0	1	1		5		0
			13		1	
x_1	3	27		8		
			37			
x_2	4	64				

4. Formule van Newton

Met behulp van de gedeelde differenties is het mogelijk het interpolatiepolynoom stapsgewijs op te bouwen.
Zij $f^*_{n-1}(x)$ het interpolatiepolynoom van $f(x)$ op de punten $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}$.
We proberen nu met behulp van $f^*_{n-1}(x)$ $f^*_n(x)$ te construeren en stellen daartoe

$$f^*_n(x) = f^*_{n-1}(x) + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \times c \ ,$$

waarin c een getal is.
$f^*_n(x)$ is nu een polynoom van hoogstens de graad n en c moet zodanig gekozen worden dat $f^*_n(x_n) = f(x_n)$. Deze eis levert

$$c = \frac{f(x_n) - f^*_{n-1}(x_n)}{\prod\limits_{i=0}^{n-1} (x_n - x_i)}$$

Uit de formule van Lagrange volgt nu

$$c = \frac{f(x_n)}{\prod\limits_{i=0}^{n-1} (x_n - x_i)} + \frac{f(x_{n-1})}{\prod\limits_{\substack{i=0\\ i\neq n-1}}^{n} (x_{n-1} - x_i)} + \dots + \frac{f(x_k)}{\prod\limits_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} (x_k - x_i)} + \dots + \frac{f(x_0)}{\prod\limits_{i=1}^{n} (x_0 - x_i)}$$

en dus met behulp van (1.3.2)

$$c = f[x_0, x_1, x_2, \dots, x_n] \ .$$

We zien nu dat we het interpolatiepolynoom als volgt kunnen schrijven:

$n = 1$; lineaire interpolatie:

$$f_1^*(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x_0,x_1] \;;$$

$n = 2$; kwadratische interpolatie:

$$f_2^*(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x_0,x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0,x_1,x_2] \;;$$

n-de orde interpolatie:

$$\begin{aligned} f_n^*(x) = {} & f(x_0) + (x - x_0)f[x_0,x_1] + \ldots + \\ & + (x - x_0) \ldots (x - x_{k-1})f[x_0,\ldots,x_k] + \ldots + \\ & + (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_{n-1})f[x_0,x_1,\ldots,x_n] \,. \end{aligned} \qquad (1.4.1)$$

We hebben nu gevonden de formule van Newton:

$$f(x) = f_n^*(x) + R_{n+1}(x) \;, \qquad (1.4.2)$$

waarin $f_n^*(x)$ gegeven wordt door (1.4.1) en $R_{n+1}(x)$ door (1.3.4).

<u>Opmerking</u>. Laat men de basispunten $x_1,x_2,\ldots,x_n$ samenvallen met x_0 dan gaat de formule van Newton, m.b.v. (1.3.3), over in

$$\begin{aligned} f(x) = {} & f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \ldots + \frac{(x - x_0)^k}{k!} f^{(k)}(x_0) + \ldots + \\ & + \frac{(x - x_0)^n}{n!} f^{(n)}(x_0) + \frac{(x - x_0)^{n+1}}{(n + 1)!} f^{n+1}(\xi) \;, \end{aligned}$$

waarin

$$\min(x_0,x) < \xi < \max(x_0,x) \;.$$

Dit is de formule van Taylor.

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

<u>Opgave</u>. Construeer het interpolatiepolynoom dat voldoet aan de gegevens van voorbeeld 5 van § 3.

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

Om de gedeelde differenties in (1.4.1) te berekenen maken we weer een differentietabel.

$$
\begin{array}{llllll}
x_0 & f(x_0) & & & & \\
 & & f[x_0,x_1] & & & \\
x_1 & f(x_1) & & f[x_0,x_1,x_2] & & \\
 & & f[x_1,x_2] & & f[x_0,x_1,x_2,x_3] & \\
x_2 & f(x_2) & & f[x_1,x_2,x_3] & & \\
 & & f[x_2,x_3] & & & \\
x_3 & f(x_3) & & & &
\end{array}
$$

Volgen we de bovenste lijn, dan vinden we

$$
\begin{aligned}
f^*(x) &= f(x_0) + (x - x_0)f[x_0,x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0,x_1,x_2] + \\
&+ (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)f[x_0,x_1,x_2,x_3] \ .
\end{aligned} \qquad (1.4.3)
$$

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

$$
\begin{aligned}
f^*(x) &= f(x_2) + (x - x_2)f[x_1,x_2] + (x - x_1)(x - x_2)f[x_1,x_2,x_3] + \\
&+ (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)f[x_0,x_1,x_2,x_3] \ .
\end{aligned} \qquad (1.4.4)
$$

(1.4.3) en (1.4.4) 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 (1.4.3) het polynoom door x_0, x_1 en x_2, en (1.4.4) het polynoom door x_1, x_2 en x_3. Moeten we interpoleren tussen x_0 en x_1, dan nemen we in dit geval (1.4.3). In het algemeen gebruiken we de differenties, die zo dicht mogelijk bij het interpolatiepunt liggen.

<u>Voorbeeld 1</u>

Zij gegeven de volgende tabel:

x	sinh(x)
0.00	0.00000
0.20	0.20134
0.30	0.30452
0.50	0.52110
0.60	0.63665
0.80	0.88811
0.90	1.02652

Bereken zo nauwkeurig mogelijk sinh(0.23).

We maken gebruik van de formule van Newton waarbij we de graad van het interpolatiepolynoom zolang verhogen tot het resultaat in 5 decimalen hetzelfde blijft.

x	sinh(x)				
0.00	0.00000				
		1.00670			
0.20	0.20134		0.08367		
		1.03180		0.17332	
0.30	0.30452		0.17033		0.00977
		1.08290		0.17918	
0.50	0.52110		0.24200		
		1.15550			
0.60	0.63665				

We volgen de zigzaglijn in de bovenstaande gedeelde differentietabel.

De opeenvolgende termen in (1.4.1) zijn:

1e term:		0.201340
2e term:	(0.03)(1.03180)	0.030954
3e term:	(0.03)(- 0.07)(0.08367)	- 0.000176
4e term:	(0.03)(- 0.07)(0.23)(0.17332)	- 0.000084
5e term:	(0.03)(- 0.07)(0.23)(- 0.27)(0.00977)	0.000001 .

De 5e term is dus te verwaarlozen, en we vinden sin(0.23) = 0.23203.

We besluiten deze paragraaf met een beschouwing over de afbreekfout en afrondingsfout.

Zoals we al eerder hebben gezien (formule (1.2.5)) is de afbreekfout bij n-de orde interpolatie

$$R_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \tag{1.4.3}$$

waarbij ξ ligt tussen het minimum en het maximum van $x, x_0, \ldots, x_n$.

Zo is in voorbeeld 1 de fout bij lineaire interpolatie:

$$R_2(0.23) = (0.03)(-0.07) \frac{\sinh(\xi)}{2} \qquad \text{met } 0.2 < \xi < 0.3 \text{ ,}$$

waaruit volgt

$$-0.00031 < R_2(0.23) < -0.00021 \text{ .}$$

In feite was de fout - 0.00026.

<u>Opgave</u>. Schat de afbreekfout bij kwadratische en derde orde interpolatie.

We bekijken nu het effect van de afrondingsfout en doen dit aan de hand van voorbeeld 1. Om de afrondingsfout in het interpolatieresultaat bij derde orde interpolatie te schatten, schatten we eerst de afrondingsfout in de gedeelde differenties. Het ongunstigste geval doet zich voor als de afrondingsfouten in de functiewaarden afwisselend + 0.5 en - 0.5 eenheid van de laatste decimaal zijn.
Dit leidt tot de volgende tabel:

	(0)			
0.00	0.00000			
		(2.5)		
		1.00670		
	(0.5)		(-42)	
0.20	0.20134		0.08367	
		(-10)		(184)
		1.03180		0.17332
	(-0.5)		(50)	
0.30	0.30452		0.17033	
		(5)		
		1.08290		
	(0.5)			
0.50	0.52110			

Tussen haakjes is aangegeven de maximaal mogelijke afrondingsfout in eenheden van de laatste decimaal tengevolge van de afrondingsfouten in de functiewaarden. Hieruit blijkt dat hogere orde differenties minder significante cijfers hebben. Dit komt door cijferverlies. De fout in het interpolatieresultaat is dus maximaal in eenheden van de 5e decimaal

$$0.5 + 0.03 \times 10 + 0.0021 \times 42 \approx 1 \text{ eenheid van de 5e decimaal.}$$

Meestal kunnen we (1.4.3) niet gebruiken om de afbreekfout te schatten, 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 niet 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 $f[x_0,x_1,\ldots,x_n,x_{n+1}]$ te gebruiken als benadering van $f[x_0,x_1,\ldots,x_n,x]$ en kunnen we $R_{n+1}(x)$ volgens (1.3.4) schatten door

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

Dit is echter de eerste verwaarloosde term uit de formule van Newton. Bij de berekening nemen we dus zoveel termen mee tot de volgende term verwaarloosbaar is. Dit is een praktisch voordeel van de formule van Newton boven die van Lagrange (vgl. de opmerkingen aan het eind van § 2).
Willen we door interpolatie in een tabel een functiewaarde zo nauwkeurig mogelijk berekenen, waarbij we een schatting van de afbreekfout willen geven met de volgende term uit de formule van Newton, dan doet zich daarbij een praktische moeilijkheid voor.
Zoals we al gezien hebben bevatten hogere orde differenties minder significante cijfers. Om de volgende term uit de formule van Newton te kunnen berekenen moet de volgende differentie dus wel een aantal significante cijfers bevatten.
We bekijken nogmaals voorbeeld 1. Bij derde orde interpolatie willen we de afbreekfout schatten door de term

$$(0.03)(- 0.07)(0.23)(- 0.27)f[0.0,0.2,0.3,0.5,0.6] .$$

Nu kan de afrondingsfout in de vierde differentie $\pm$ 0.00723 zijn (ga dit na!). Hieruit volgt nu dat de volgende term maximaal 2×10^{-6} kan zijn.

5. Interpolatiemethode van Aitken-Neville

De formule van Newton gaf de mogelijkheid om met een tabel van de functie f op de punten $x_0, x_1, x_2, \ldots$ de waarde van f in een punt x te benaderen door een polynoom van juist voldoend hoge graad. Hierbij werd het interpolatiepolynoom stap voor stap opgebouwd.
We bespreken nu twee andere algoritmen om het interpolatiepolynoom stap voor stap op te bouwen, die berusten op het volgende lemma.

Lemma. Zij $P_0(x)$ het interpolatiepolynoom van f op de punten $x_0, x_1, \ldots, x_{k-1}$ en zij $P_1(x)$ het interpolatiepolynoom van f op de punten $x_1, x_2, \ldots, x_k$.
Zij

$$P(x) := \frac{(x_k - x)P_0(x) - (x_0 - x)P_1(x)}{x_k - x_0},$$

dan is P(x) het interpolatiepolynoom van f op de punten $x_0, x_1, \ldots, x_k$.

Bewijs. Omdat $P_0(x)$ en $P_1(x)$ beide polynomen zijn van de graad $\le k-1$ is P(x) een polynoom van de graad $\le k$. We tonen nu nog aan dat $P(x_j) = f(x_j)$ voor $j = 0,1,\ldots,k$. Dit volgt direct uit

$$P_0(x_j) = f(x_j) \quad \text{voor } j = 0,1,\ldots,k-1$$

en

$$P_1(x_j) = f(x_j) \quad \text{voor } j = 1,2,\ldots,k \ .$$

Immers

$$P(x_0) = \frac{x_k - x_0}{x_k - x_0} P_0(x_0) = f(x_0)$$

$$P(x_j) = \frac{(x_k - x_j)P_0(x_j) - (x_0 - x_j)P_1(x_j)}{x_k - x_0} = f(x_j) \ , \qquad j = 1,\ldots,k-1$$

$$P(x_k) = -\frac{x_0 - x_k}{x_k - x_0} P_1(x_k) = f(x_k) \ .$$

Dit lemma gebruiken we om algoritmen te maken om de waarde van een interpolatiepolynoom met steeds hogere graad te berekenen voor een gegeven x.
Voor het beschrijven van deze algoritmen voeren we de volgende notatie in:

$f_{0,1,2,\ldots,k-1,k}(x)$:= het interpolatiepolynoom van f op de punten $x_0,x_1,x_2,\ldots,x_{k-1},x_k$.

Aitkens algoritme

Deze algoritme berekent rij na rij de getallen uit de volgende tabel:

$$\begin{array}{lllllll}
x_0 & x_0 - x & f_0(x) & & & & \\
x_1 & \underline{x_1 - x} & f_1(x) & \underline{f_{01}(x)} & & & \\
x_2 & x_2 - x & f_2(x) & f_{02}(x) & f_{012}(x) & & \\
x_3 & x_3 - x & f_3(x) & f_{03}(x) & f_{013}(x) & f_{0123}(x) & \\
x_4 & \underline{x_4 - x} & f_4(x) & \underline{f_{04}(x)} & \underline{f_{014}(x)} & f_{0124}(x) & f_{01234}(x) \quad \ddots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots
\end{array}$$

Zo wordt bv. $f_{014}(x)$ berekend (vgl. lemma!)

$$f_{014}(x) = \frac{(x_4 - x)f_{01}(x) - (x_1 - x)f_{04}(x)}{x_4 - x_1} .$$

Algemeen geldt voor de m-de rij

$$\begin{cases} f_m(x) = f(x_m) \\ f_{012\ldots k\,m} = \dfrac{(x_m - x)f_{01\ldots k}(x) - (x_k - x)f_{01\ldots k-1,m}(x)}{x_m - x_k} , \quad k = 0,1,\ldots,m-1 \end{cases}$$

Opmerking. De waarden langs de bovenste diagonaal: $f_0(x),f_{01}(x),f_{012}(x),\ldots$ zijn de waarden van opvolgende Newton interpolatiepolynomen. Convergentie en schatting van de afbreekfout concluderen we dus uit het gedrag van deze diagonaal.

Voorbeeld 1

We berekenen nogmaals sinh(0.23) met de tabel van voorbeeld 1 van § 4. We kiezen als eerste punt 0.20, omdat dit het dichtste bij 0.23 ligt, vervolgens 0.30, enz.

0.20	- 3	0.20134				
0.30	7	0.30452	0.232294			
0.00	-23	0.00000	0.231541	0.232118		
0.50	27	0.52110	0.233316	0.231936	0.232034	
0.60	37	0.63665	0.233988	0.231899	0.232034	0.232034 .

Een alternatieve mogelijkheid is de volgende.

Neville's algoritme

Deze algoritme berekent rij na rij de getallen uit de volgende tabel:

$$
\begin{array}{lllllll}
x_0 & x_0 - x & f_0(x) & & & & \\
x_1 & x_1 - x & f_1(x) & f_{01}(x) & & & \\
x_2 & \underline{x_2 - x} & f_2(x) & f_{12}(x) & f_{012}(x) & & \\
x_3 & x_3 - x & f_3(x) & \underline{f_{23}(x)} & f_{123}(x) & f_{0123}(x) & \\
x_4 & \underline{x_4 - x} & f_4(x) & \underline{f_{34}(x)} & \underline{f_{234}(x)} & f_{1234}(x) & f_{01234}(x) \quad \ddots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \quad \ddots
\end{array}
$$

Algemeen geldt voor de m-de rij

$$f_m(x) = f(x_m)$$

$$f_{i,i+1,\ldots,m-1,m}(x) = \frac{(x_m - x)f_{i,i+1,\ldots,m-1}(x) - (x_i - x)f_{i+1,i+2,\ldots,m-1,m}(x)}{x_m - x_i} .$$

Voorbeeld 2

Berekening van sinh(0.23) (vgl. voorbeeld 1) met Neville's algoritme levert

0.20	- 3	0.20134				
0.30	7	0.30452	0.232294			
0.00	-23	0.00000	0.233465	0.232118		
0.50	27	0.52110	0.239706	0.231281	0.232034	
0.60	37	0.63665	0.209115	0.227979	0.232051	0.232035 .

6. 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	sin x
0.725	0.66313544
0.726	0.66388361
0.727	0.66463111
0.728	0.66537795 .

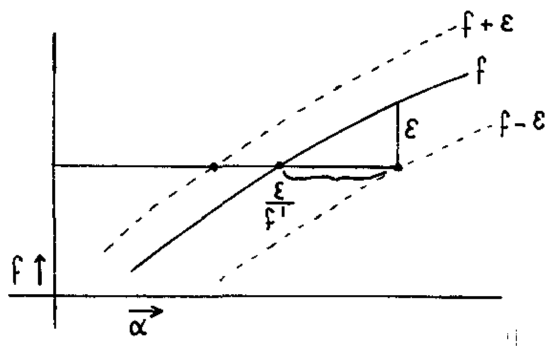
Bepaal x zodat sin x = 0.664.
We gebruiken Aitken:

0.66313544	- 86456	0.725		
0.66388361	- 11639	0.726	0.72615557	
0.66463111	63111	0.727	0.72615608	0.72615565
0.66537795	137795	0.728	0.72615660	0.72615565

Het resultaat is x = 0.72615565.

De vraag is nu: hoeveel goede cijfers kunnen we voor x garanderen? Uit de berekening blijkt dat de afbreekfout klein genoeg is. We proberen nu de afrondfout in het resultaat te schatten.

Nu geldt als de fout in $y = f(x)$ gelijk is aan ε, dat de fout in de inverse functie $x = g(y)$ ongeveer $\frac{\varepsilon}{f'(x)}$ is.
De afgeleide $f'(x)$ schatten we met een differentie.



Hieruit volgt nu dat de haalbare nauwkeurigheid voor x in voorbeeld 1 ongeveer gelijk is aan $(\frac{1}{2}10^{-8})/(0.74) \approx 0.7\ 10^{-8}$, dus alle cijfers in de opgegeven waarde voor x zijn significant.

Het is verstandig om van tevoren de haalbare nauwkeurigheid bij inverse interpolatie te schatten om te weten hoeveel cijfers men bij de berekening moet meenemen.

Opgave. Zij gegeven de volgende tabel van $f(x) = x^3$.

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

Bepaal x zodat $f(x) = 20$.
Verklaar Uw resultaten.

Hoofdstuk I Interpolatie met ongelijke intervallen

1. Rekenen met onnauwkeurige getallen

Berekeningen met een tafelrekenmachine.

Zij $x = \dfrac{a \times b - c \times d}{p \times (q + r)}$, waarbij

$$a = 0.728,\ b = 1.0372916,\ c = 3.15297,\ d = 0.2395279016,$$
$$p = 0.231,\ q = 0.108 \times 10^{-3},\ r = 0.1841762 \times 10^{-3}.$$

Bereken x in 6 decimalen. Schrijf alle tussenresultaten op.
Veronderstel dat de getallen a t/m r correcte afrondingen zijn van de reële getallen $\bar{a}$ t/m $\bar{r}$; dat wil zeggen dat bijvoorbeeld $\bar{a}$ ligt in het onzekerheidsinterval [0.7275 , 0.7285].

Zij $\bar{x} = \dfrac{\bar{a} \times \bar{b} - \bar{c} \times \bar{d}}{\bar{p} \times (\bar{q} + \bar{r})}$.

Bepaal het onzekerheidsinterval waarin $\bar{x}$ ligt. Doe dit door achtereenvolgens na te gaan in welk interval $\bar{a} \times \bar{b}$, $\bar{c} \times \bar{d}$, $\bar{a} \times \bar{b} - \bar{c} \times \bar{d}$, enz. ligt. Noteer alle resultaten.

1) Voor de vermenigvuldiging gelden de volgende vuistregels:
   Als het getal a n significante cijfers heeft en het getal b heeft m significante cijfers, dan heeft a × b een aantal significante cijfers dat ongeveer gelijk is aan min(m,n).
   Als het getal a een relatieve fout δa heeft en b een relatieve fout δb heeft, dan heeft a × b een relatieve fout die ongeveer gelijk is aan δa + δb, en als δa >> δb een relatieve fout die ongeveer gelijk is aan δa. Verifieer deze uitspraken aan de hand van Uw berekeningen.
   Formuleer aan de hand van de berekeningen soortgelijke uitspraken voor de bewerkingen: optellen, aftrekken en delen.
2) Hoeveel significante cijfers heeft x aangenomen dat alle getallen a t/m r correct zijn afgerond?
3) Neem aan dat de waarde van a (= 0.728) exact is. Bepaal dan met behulp van de vuistregels het aantal significante cijfers van x. Bereken ook het onzekerheidsinterval van $\bar{x}$ en vergelijk deze twee resultaten.
4) Geef, aangenomen dat de waarde van a exact is, bij ieder van de overige getallen aan op hoeveel cijfers het getal afgerond kan worden, zonder dat het resultaat significant verandert. Bereken bij deze opnieuw afgeronde getallen weer het onzekerheidsinterval van $\bar{x}$.

2. Gegeven:

x	f(x)
136.00	2.71506
136.36	2.59368
136.82	2.47265
137.00	2.35197
137.05	2.23164
137.15	2.11165
137.17	1.99200

Bereken $f^*(x)$ voor $x = 136.13$, 136.71, 136.96, 137.03, 137.13 en 137.162 met behulp van lineaire interpolatie.

3. Bereken de Lagrange-coëfficiënten voor de punten

$$(x_0, x_1, x_2, x_3) = (0,1,2,5) \; .$$

Controleer de betrekking $\sum_{i=0}^{3} L_i(x) \equiv 1$.

Bepaal het polynoom $f^*(x)$ van zo laag mogelijke graad door de punten $(0,2)$, $(1,3)$, $(2,12)$, $(5,147)$.

4. Maak een tabel van gedeelde differenties bij de volgende gegevens:

x	f(x)
1.1275	0.11971
1.1503	0.13954
1.1735	0.15932
1.1972	0.17903

Verander $f(x)$ in een paar punten met een halve eenheid in de laatste decimaal en maak opnieuw een differentietabel. Herhaal dit nog eenmaal.
Wat volgt hieruit voor het aantal significante cijfers van de differenties?

5. Gegeven: $f(x)$ is een polynoom van de derde graad,
$f(0) = 3$, $f(1) = 4$, $f(3) = 30$, $f(6) = 219$.

Maak een differentietabel, waaruit men kan aflezen: $f'(8)$ en $f''(8)$.
Bereken daarna $f(x)$ en controleer Uw antwoorden.

6. Gegeven:

x	f(x)
0.4	0.68916
0.5	0.61708
0.6	0.54851
0.8	0.42371
1.0	0.31731
1.25	0.21130

Bereken zo nauwkeurig mogelijk: f(0.7), f(0.9), f(1.1) en f(1.2).
Geef een schatting van de afbreekfout en van de afrondingsfout.

7. Zij gegeven een tabel van sin(x) voor x = 0(0.2)2.
Welke nauwkeurigheid is bereikbaar voor willekeurig argument met 4-punts interpolatie?

8. Gegeven:

x	sin x
3.5	- 0.350783
3.6	- 0.442520
3.7	- 0.529836
3.8	- 0.611858
3.9	- 0.687766
4.0	- 0.756802
4.1	- 0.818277
4.2	- 0.871576
4.3	- 0.916166
4.4	- 0.951602
4.5	- 0.977530
4.6	- 0.993691
4.7	- 0.999923
4.8	- 0.996165
4.9	- 0.982453
5.0	- 0.958924

Bereken sin 4.238 en sin 4.431 met de interpolatiemethode van Aitken en met de interpolatiemethode van Neville.

9. Gegeven:

x	f(x)
1.1	0.769
1.2	0.472
1.3	0.103
1.4	- 0.344
1.5	- 0.875

Bereken het nulpunt van f(x) tussen 1.3 en 1.4. Geef een schatting van de nauwkeurigheid van Uw antwoord.

Aanvulling Hoofdstuk I.

1. Bewijs de volgende formules

$$\sum_{k=0}^{n} x_k L_k(x) = x \qquad (n \geq 1) ;$$

$$\sum_{k=0}^{n} (x - x_k)L_k(x) = 0 \qquad (n \geq 1) .$$

2. Bereken het polynoom van zo laag mogelijke graad, dat voor $x = 2,4,5,10$ de waarden 3,7,9 resp. 19 aanneemt.

3. Bewijs de formule

$$L_0(x) = 1 + \frac{x - x_0}{x_0 - x_1} + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + \dots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_n)} .$$

Aanwijzing: Pas Newton's formule toe op $L_0(x)$.

4. Gegeven

x	$f(x)$	$f'(x)$
0.0	1.0000	-0.7979
0.5	0.6171	-0.7041
1.0	0.3173	-0.4839

Maak bij deze gegevens een differentietabel en bereken daaruit: $f(0.2)$ en $f(0.6)$.

Geef een schatting van de afbreekfout en van de afrondingsfout.

5. Hoe fijn moet $\log(x)$ getabelleerd worden voor $1 \leq x \leq 10$ om te bereiken dat derde orde interpolatie een precisie van 6 decimalen levert?

6. Gegeven:

x	f(x)
1.515	0.998444
1.520	0.998710
1.525	0.998952
1.530	0.999168
1.535	0.999359
1.540	0.999526
1.545	0.999667
1.550	0.999784
1.555	0.999875
1.560	0.999942

Bepaal x zodat f(x) = 0.999693.

Geef een schatting van de nauwkeurigheid van Uw antwoord.

Hoofdstuk II. Interpolatie op equidistante punten

1. Formule van Lagrange

Als de punten equidistant zijn is het mogelijk de interpolatieformules eenvoudiger op te schrijven. We kijken eerst naar de interpolatieformule van Lagrange (1.2.5).

We voeren in de variabele p, gedefinieerd door

$$p := \frac{x - x_0}{h} , \qquad (2.1.1)$$

waarin h de afstand tussen twee opeenvolgende punten is.

De Lagrange coëfficiënten $L_k(x)$ uit (1.2.1) zijn nu te schrijven als

$$L_k(p) = \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{(p - i)}{(k - i)} = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n - k)!} \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} (p - i) . \qquad (2.1.2)$$

Geven we de functiewaarde in het punt x_i aan met f_i, dan kunnen we (1.2.5) schrijven als

$$f(x_0 + ph) = \sum_{k=0}^{n} L_k(p)f_k + h^{n+1} \prod_{i=0}^{n} (p - i) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n + 1)!} . \qquad (2.1.3)$$

De functies $L_k(p)$ zijn onafhankelijk van h.

Voorbeeld 1. Bij kwadratische interpolatie is

$$L_0(p) = \frac{(p - 1)(p - 2)}{2} , \quad L_1(p) = \frac{p(p - 2)}{-1} , \quad L_2(p) = \frac{p(p - 1)}{2} .$$

Zij gegeven de volgende tabel

x	1.00	1.10	1.20	1.30
sin(x)	0.8415	0.8912	0.9320	0.9636

Bereken sin(1.24) met kwadratische interpolatie.

We gebruiken de punten 1.10, 1.20 en 1.30

$$p = \frac{0.14}{0.1} = 1.4 ,$$

$$f^*(1.24) = (-0.12)(0.8912) + (0.84)(0.9320) + (0.28)(0.9636) = 0.94574 .$$

Een sinustabel levert

$$\sin(1.24) = 0.94578 \ .$$

Om dezelfde redenen als vermeld aan het eind van § 2 van hoofdstuk I is het werken met de formule van Lagrange ook bij equidistante punten in de praktijk onaantrekkelijk. We gaan daarom het interpolatiepolynoom weer wat anders opschrijven. Dit geeft aanleiding tot een hele reeks interpolatieformules, die ieder hun specifieke voor- of nadelen hebben. In deze formules wordt gebruik gemaakt van differenties, die we allereerst zullen behandelen.

2. Differenties

Wanneer de basispunten equidistant zijn, is het niet praktisch met gedeelde differenties te werken. Immers bij de berekening hiervan moet men steeds delen door factoren van de vorm $x_i - x_j$. Dit zijn echter steeds veelvouden 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 zullen we aangeven met f_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 weer 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.

$$
\begin{array}{cccccc}
x & f(x) & & & \\
 & & & & \\
x_{-2} & f_{-2} & & \nabla^2 f_{-1} & \\
 & & \nabla f_{-1} & & \nabla^3 f_0 \\
x_{-1} & f_{-1} & & \nabla^2 f_0 & \\
 & & \nabla f_0 & & \nabla^3 f_1 \\
x_0 & f_0 & & \nabla^2 f_1 & \\
 & & \nabla f_1 & & \nabla^3 f_2 \\
x_1 & f_1 & & \nabla^2 f_2 & \\
 & & \nabla f_2 & & \nabla^3 f_3 \\
x_2 & f_2 & & \nabla^2 f_3 &
\end{array}
$$

Achterwaartse differenties.

Differenties met dezelfde onderindex liggen op een achterwaartse diagonaal.

$$
\begin{array}{cccccc}
x & f(x) & & & & \\
 & & & & & \\
x_{-2} & f_{-2} & & \delta^2 f_{-2} & & \delta^4 f_{-2} \\
 & & \delta f_{-3/2} & & \delta^3 f_{-3/2} & \\
x_{-1} & f_{-1} & & \delta^2 f_{-1} & & \delta^4 f_{-1} \\
 & & \delta f_{-\frac{1}{2}} & & \delta^3 f_{-\frac{1}{2}} & \\
x_0 & f_0 & & \delta^2 f_0 & & \delta^4 f_0 \\
 & & \delta f_{\frac{1}{2}} & & \delta^3 f_{\frac{1}{2}} & \\
x_1 & f_1 & & \delta^2 f_1 & & \delta^4 f_1 \\
 & & \delta f_{3/2} & & \delta^3 f_{3/2} & \\
x_2 & f_2 & & \delta^2 f_2 & & \delta^4 f_2
\end{array}
$$

Centrale differenties.

Differenties met dezelfde onderindex liggen op een horizontale lijn.

Merk op dat $\delta f_1 = f_{3/2} - f_{\frac{1}{2}}$ in de differentietabel niet voorkomt en ook niet kan worden berekend als van $f(x)$ alleen een tabel is gegeven. Algemeen geldt dit voor $\delta^{2n+1} f_i$ (i geheel).

Voorbeeld 1

$f(x) = x^3$ $\quad$ $x = 1(1)6$

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		$\boxed{6}$		
$x_2 = 5$	125		30			
		91				
$x_3 = 6$	216					

De omrande derde differentie is in de drie notaties resp. $\Delta^3 f_0$, $\nabla^3 f_3$ en $\delta^3 f_{3/2}$.
Er gelden de volgende relaties:

$$\Delta^n f_k = \nabla^n f_{k+n} = \delta^n f_{k+\frac{n}{2}} \,. \tag{2.2.1}$$

Opmerking 1. Als er geen verwarring mogelijk is, schrijft men voor $\Delta^n f_i$ vaak kort Δ_i^n. Evenzo schrijft men ∇_i^n en δ_i^n.

Opmerking 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 bijv.

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

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

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

In het algemeen luidt dit verband

$$\Delta^n f_k = \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \binom{n}{i} f_{k+i} . \tag{2.2.2}$$

We bewijzen deze formule met volledige inductie naar n en met behulp van de volgende eigenschap van de binomiaal coëfficiënten

$$\binom{n}{i} = \binom{n-1}{i-1} + \binom{n-1}{i} .$$

Bewijs. Voor $n = 0$ is de formule triviaal.
Zij de formule waar voor $m = n-1$

$$\Delta^n f_k = \Delta^{n-1} f_{k+1} - \Delta^{n-1} f_k = \sum_{i=0}^{n-1} (-1)^{n-i-1} \binom{n-1}{i} f_{k+i+1} +$$

$$- \sum_{i=0}^{n-1} (-1)^{n-i-1} \binom{n-1}{i} f_{k+i} = (-1)^n f_k + \sum_{i=1}^{n-1} (-1)^{n-i} \binom{n}{i} f_{k+i} + f_{k+n} =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} \binom{n}{i} f_{k+i} .$$

Omgekeerd kan men ook een functiewaarde in differenties uitdrukken, nl.

$$f_{k+n} = \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} \Delta^i f_k . \tag{2.2.3}$$

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

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

$$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - [f\ x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i} =$$

$$= \frac{1}{2h} \left(\frac{1}{h} \Delta f_{i+1} - \frac{1}{h} \Delta f_i\right) = \frac{1}{2h^2} \Delta^2 f_i = \frac{1}{2h^2} \nabla^2 f_{i+2} = \frac{1}{2h^2} \delta^2 f_{i+1} .$$

Met volledige inductie bewijst men:

$$f[x_i,x_{i+1},\dots,x_{i+n}] = \frac{1}{n!h^n}\,\Delta^n f_i \tag{2.2.4}$$

$$f[x_i,x_{i+1},\dots,x_{i+n}] = \frac{1}{n!h^n}\,\nabla^n f_{i+n} \tag{2.2.5}$$

$$f[x_i,x_{i+1},\dots,x_{i+n}] = \frac{1}{n!h^n}\,\delta^n f_{i+\frac{n}{2}}\ . \tag{2.2.6}$$

Opgave. Bewijs deze formules.

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

$$\Delta^n f_i = h^n f^{(n)}(\xi) \tag{2.2.7}$$

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 bijv. gehalveerd, dan worden de differenties van orde n ongeveer een factor $\frac{1}{2^n}$ kleiner.

Opmerking. Uit (2.2.7) 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

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

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) Een economische manier om een tabel te maken van een polynoom is het behulp van een differentietabel. We lichten dit toe aan de hand van een voorbeeld.

Voorbeeld 1. Gevraagd wordt $f(x) = x^3 + 3x^2 + 2x + 1$ te berekenen voor $x = 0(1)10$. We berekenen eerst $f(x)$ voor $x = 0(1)4$ en vervolgens het gedeelte van de differentietabel boven de aangegeven diagonaal. Het punt $x = 4$ is meegenomen ter controle. Omdat we weten dat de derde differenties constant zijn (immers $f(x)$ is een polynoom van de derde graad) kunnen we nu de rest van de tabel berekenen door herhaalde optelling. Uit de derde differenties berekenen we de tweede differenties etc.

x	f(x)				
0	1				
		6			
1	7		12		
		18		6	
2	25		18		start
		36		6	direct berekend ter controle
3	61		24		
		60		6	
4	121		30		
		90		6	
5	211		36		
		126		6	
6	337		42		
		168		6	
7	505		48		
		216		6	
8	721		54		
		270		6	
9	991		60		
		330			
10	1321				

b) Uit het verband tussen differenties en afgeleiden (formule (2.2.7)) volgt dat voor voldoende vaak differentieerbare functies de differenties een regelmatig verloop hebben. Dit geeft ons nu de mogelijkheid om toevallige fouten in een tabel op te sporen. We zullen eens nagaan hoe een fout f in een functiewaarde zich voortplant in de differentietabel. We maken een differentietabel van de fout.

0		0		0
	0		0	
0		0		f
	0		f	
0		f		−4f
	f		−3f	
f		−2f		6f
	−f		3f	
0		f		−4f
	0		−f	
0		0		f
	0		0	
0		0		0

Merk op dat in elke kolom juist de binomiaal coëfficiënten voorkomen. De invloed van de fout neemt toe met de orde van de differentie.
We gaan dit foutenverloop nu gebruiken om een fout in de volgende tabel op te sporen.

<u>Voorbeeld 2</u>. Zij gegeven de volgende tabel:

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 f = -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.

c) Als we een tabel van een functie hebben zal deze zijn afgerond op een aantal decimalen, d.w.z. afrondingsfouten bevatten. We hebben in het voorafgaande de foutvoortplanting in de differentietabel bekeken ten gevolge van één (overheersende) fout in de functiewaarden. We bekijken nu het effect van de afrondingsfout op de differentietabel. Het ongunstigste geval doet zich voor als de afrondingsfout in de functiewaarden afwisselend + 0.5 en − 0.5 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				

We zien dat in dit geval de fout in de n-de differentie maximaal $\pm\ 2^{n-1}$ eenheid van de laatste decimaal zijn. In de praktijk zal de fout altijd wel een stuk kleiner zijn.

Voorbeeld 3. Zij gegeven de volgende tabel:

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

De vierde differentie heeft een grote afrondingsfout. Het onregelmatige verloop suggereert dit (geen bewijs). Een bewijs is dat $\Delta^4 f = 10^{-4} \sin(\xi)$ en dus voor de omrande differenties $|\sin \xi| > 1$ oplevert.

Het heeft geen zin nog hogere differenties te berekenen omdat deze niet meer significant zullen zijn.

4. Interpolatieformules met differenties

a) Voorwaartse formule van Newton-Gregory.

Veronderstel dat we willen interpoleren in de buurt van een punt x_0, dat aan het begin van een tabel ligt. Er zijn dan alleen voorwaartse differenties beschikbaar.

$$
\begin{array}{ccccc}
x_0 & f_0 & & & \\
 & & \Delta f_0 & & \\
x_1 & f_1 & & \Delta^2 f_0 & \\
 & & \Delta f_1 & & \Delta^3 f_0 \\
x_2 & f_2 & & \Delta^2 f_1 & \vdots \\
 & & \Delta f_2 & \vdots & \vdots \\
x_3 & f_3 & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots
\end{array}
$$

Het interpolatiepolynoom door de punten $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n, \ldots$ wordt gegeven door (1.4.1)

$$
\begin{aligned}
f^*(x) = f_0 &+ (x - x_0)f[x_0,x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0,x_1,x_2] + \ldots \\
&+ (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_{n-1})f[x_0,x_1,x_2,\ldots,x_n] + \ldots \, . \qquad (2.4.1)
\end{aligned}
$$

Stellen we $x = x_0 + ph$ en gebruiken we (2.2.4) dan kunnen we (2.4.1) schrijven als

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + p\Delta f_0 + \frac{p(p-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \ldots + \frac{p(p-1)\ldots(p-n+1)}{n!}\Delta^n f_0 + \ldots \qquad (2.4.2)$$

We definiëren

$$\binom{p}{k} := \frac{p(p-1)\ldots(p-k+1)}{k!} \qquad (2.4.3)$$

dan volgt

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \binom{p}{1}\Delta f_0 + \binom{p}{2}\Delta^2 f_0 + \ldots + \binom{p}{n}\Delta^n f_0 + \ldots \qquad (2.4.4)$$

Formule (2.4.4) heet de voorwaartse formule van Newton-Gregory.

Voor de restterm vinden we bij afbreken na de n-de differentie

$$R_{n+1}(x_0 + ph) = \binom{p}{n+1} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi) \ , \qquad (2.4.5)$$

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

Opmerkingen

De restterm (2.4.5) kunnen we schatten met

$$R_{n+1} \approx \binom{p}{n+1} \Delta^{n+1} f_0 \ ,$$

dit is weer de eerste weggelaten term.
Als p = n vinden we

$$f_n = f_0 + \binom{n}{1}\Delta f_0 + \binom{n}{2}\Delta^2 f_0 + \ldots + \Delta^n f_0 = \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} \Delta^i f_0$$

(vgl. formule (2.2.3)).

Voorbeeld. Zij gegeven de tabel van sin(x) uit § 3. Bereken sin(1.02).
We nemen $x_0 = 1.0$, dus $p = 0.2$.

$$\begin{array}{llr}
f_0 & & = 0.84147 \\
p\Delta f_0 & = (0.2) \times (4974) & = \quad 9948 \\
\binom{p}{2}\Delta^2 f_0 & = (-0.08) \times (-891) & = \quad 713 \\
\binom{p}{3}\Delta^3 f_0 & = (0.048) \times (-40) & = \quad -19 \\
\binom{p}{4}\Delta^4 f_0 & = (0.034) \times 8 & = \quad -3 \\
 & & + \overline{\qquad\qquad} \\
 & & 0.852109
\end{array}$$

afgerond op 5 decimalen sin(1.02) = 0.85211.

Tengevolge van afrondingsfouten in de functiewaarden bevat het interpolatieresultaat een afrondingsfout die maximaal

$$0.5 + (0.2) \times (1) + (0.08) \times 2 + (0.048) \times 4 + (0.034) \times 8 \approx 1.2$$

eenheid van de 5e decimaal.

Opgave. Schat de afbreekfout.

b) Achterwaartse formule van Newton-Gregory.

Willen we interpoleren in de buurt van een punt x_0, dat aan het eind van een tabel ligt, dan zijn alleen achterwaartse differenties beschikbaar.

$$
\begin{array}{ccccc}
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
x_{-3} & f_{-3} & & & \\
 & & \nabla f_{-2} & & \\
x_{-2} & f_{-2} & & \nabla^2 f_{-1} & \\
 & & \nabla f_{-1} & & \nabla^3 f_0 \\
x_{-1} & f_{-1} & & \nabla^2 f_0 & \\
 & & \nabla f_0 & & \\
x_0 & f_0 & & &
\end{array}
$$

Stellen we weer $x = x_0 + ph$ dan wordt het interpolatiepolynoom door de punten $x_0, x_{-1}, x_{-2}, \ldots, x_{-n}, \ldots$ gegeven door

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 - \binom{-p}{1}\nabla f_0 + \binom{-p}{2}\nabla^2 f_0 + \ldots + (-1)^n\binom{-p}{n}\nabla^n f_0 + \ldots \quad (2.4.6)$$

Formule (2.4.6) heet de <u>achterwaartse formule van Newton-Gregory</u>.

c) Centrale formules.

Bij interpolatie midden in een tabel maken we gebruik van punten, die symmetrisch rond het interpolatiepunt liggen. Dit geeft interpolatieformules met centrale differenties.

$$
\begin{array}{cccccc}
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
x_{-2} & f_{-2} & & & & \\
 & & \delta f_{-3/2} & & & \\
x_{-1} & f_{-1} & & \delta^2 f_{-1} & & \\
 & & \delta f_{-\frac{1}{2}} & & \delta^3 f_{-\frac{1}{2}} & \\
x_0 & f_0 & & \delta^2 f_0 & & \delta^4 f_0 \\
 & & \delta f_{\frac{1}{2}} & & \delta^3 f_{\frac{1}{2}} & \\
x_1 & f_1 & & \delta^2 f_1 & & \\
 & & \delta f_{3/2} & & & \\
x_2 & f_2 & & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots
\end{array}
$$

Het interpolatiepolynoom door de punten $x_0, x_1, x_{-1}, x_2, x_{-2}, \ldots$ (we volgen de getrokken lijn!) wordt gegeven door

$$
\begin{aligned}
f^*(x) &= f_0 + (x - x_0)f[x_0,x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_{-1},x_0,x_1] + \\
&\quad + (x - x_{-1})(x - x_0)(x - x_1)f[x_{-1},x_0,x_1,x_2] + \ldots \,. \qquad (2.4.7)
\end{aligned}
$$

Stellen we $x = x_0 + ph$, dan vinden we met behulp van (2.2.6)

$$
\begin{aligned}
f^*(x_0 + ph) &= f_0 + \binom{p}{1}\delta f_{\frac{1}{2}} + \binom{p}{2}\delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3}\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{4}\delta^4 f_0 + \ldots \\
&\quad + \binom{p+n-1}{2n}\delta^{2n} f_0 + \binom{p+n}{2n+1}\delta^{2n+1} f_{\frac{1}{2}} + \ldots \,. \qquad (2.4.8)
\end{aligned}
$$

De restterm bij afbreken na de n-de differentie wordt gegeven door

$$
R_{n+1}(x_0 + ph) = \binom{p+n\div 2}{n+1} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi) \,.
$$

Formule (2.4.8) heet de <u>voorwaartse formule van Gauss</u>.

Door het volgen van de gestippelde lijn vinden we de <u>achterwaartse formule van Gauss</u>:

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + \binom{p}{1}\delta f_{-\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{2}\delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3}\delta^3 f_{-\frac{1}{2}} + \binom{p+2}{4}\delta^4 f_0 + \dots$$
$$+ \binom{p+n}{2n}\delta^{2n} f_0 + \binom{p+n}{2n+1}\delta^{2n+1} f_{-\frac{1}{2}} + \dots \, . \qquad (2.4.9)$$

De restterm bij afbreken na de n-de differentie wordt nu gegeven door

$$R_{n+1}(x_0 + ph) = \binom{p+(n+1)\div 2}{n+1} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi)$$

Drukken we in (2.4.8) de oneven differenties uit in verschillen van even differenties, dan vinden we de <u>formule van Everett</u>

$$f^*(x_0 + ph) = (1-p)f_0 + pf_1 - \binom{p}{3}\delta^2 f_0 + \binom{p+1}{3}\delta^2 f_1 - \binom{p+1}{5}\delta^4 f_0 + \binom{p+2}{5}\delta^4 f_1 + \dots$$
$$- \binom{p+n-1}{2n+1}\delta^{2n} f_0 + \binom{p+n}{2n+1}\delta^{2n} f_1 + \dots \, . \qquad (2.4.10)$$

<u>Opgave</u>. Ga dit na. Gebruik hierbij de formule

$$\binom{p+1}{k+1} = \binom{p}{k} + \binom{p}{k+1} \, .$$

<u>Opmerkingen</u>

Interpolatie voor $p = \frac{1}{2}$ komt vaak voor.
Uit de formule van Everett volgt:

$$f^*(x_0 + \tfrac{1}{2}h) = \tfrac{1}{2}(f_0 + f_1) - \frac{1}{16}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \frac{3}{256}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \dots$$
$$+ \binom{n+\frac{1}{2}}{2n+1}(\delta^{2n} f_0 + \delta^{2n} f_1) + \dots \, . \qquad (2.4.11)$$

De formule van Everett is aantrekkelijk omdat zonder moeite een extra differentie wordt meegenomen. Afbreken na de tweede differentie levert derde orde interpolatie.

Tot slot vermelden we nog de formule, die ontstaat uit het gemiddelde van de voorwaartse formule van Gauss met als eerste punt x_0 en de achterwaartse formule van Gauss met als eerste punt x_1:

$$f^*(x_0 + ph) = \tfrac{1}{2}[f_0 + f_1 + \left(\binom{p}{1} + \binom{p-1}{1}\right)\delta f_{\frac{1}{2}} +$$
$$+ \binom{p}{2}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \left(\binom{p+1}{3} + \binom{p}{3}\right)\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \binom{p+1}{4}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \dots] \qquad (2.4.12)$$

of

$$f^*(x_0 + ph) = f_0 + p\delta f_{\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) +$$

$$+ \frac{1}{3}(p - \tfrac{1}{2})\binom{p}{2}\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\binom{p+1}{4}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \dots \quad (2.4.13)$$

Formule (2.4.13) heet de <u>formule van Bessel</u>.

Merk op dat de formule van Bessel, als deze eindigt na de differentie δ^{2n}, een polynoom is dat samenvalt met f in de punten $x_{-n+1}, x_{-n+2}, \dots, x_{n-1}, x_n$. Dit zijn 2n punten in plaats van 2n + 1.

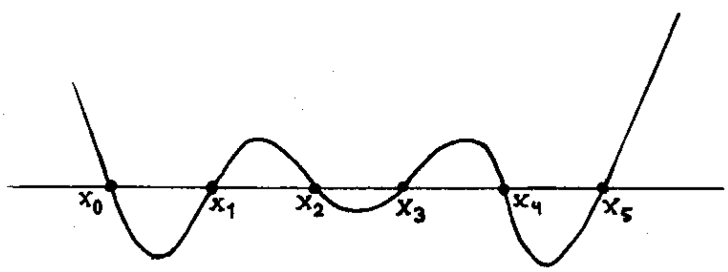
5. Het gebruik van interpolatieformules

De restterm bij n-de orde interpolatie op de steunpunten $x_0, x_1, \dots, x_n$ is

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

Als $f^{(n+1)}$ niet veel varieert is het voordelig de steunpunten zoveel mogelijk symmetrisch rond het interpolatiepunt te kiezen. We lichten dit nog eens toe voor n = 5.

De grafiek van de functie $(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_5)$ ziet er globaal als volgt uit:



Hieraan zien we duidelijk dat het voordelig is als het interpolatiepunt tussen x_2 en x_3 ligt.

Nu zijn alle behandelde interpolatieformules, als ze gebruik maken van dezelfde steunpunten, equivalent.
Het bezwaar van het gebruik van een voorwaartse formule is echter dat, als men de steunpunten symmetrisch rond het interpolatiepunt wil hebben, men x_0

pas kan kiezen als de graad van het polynoom vast ligt. Een centrale formule zorgt hier automatisch voor.

Kiest men het punt x_0 zo dat het zo dicht mogelijk bij het interpolatiepunt ligt, dan zullen de coëfficiënten van een centrale formule sneller kleiner worden dan die van een voorwaartse formule.
Bijvoorbeeld $p = \frac{1}{2}$.

coëfficiënten van	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4	Δ^5
voorwaarts Newton	0.5	-0.125	0.0625	0.039	0.027
voorwaarts Gauss	0.5	-0.125	-0.0625	0.023	0.011
Everett	-	-0.0625	-	0.017	-
	-	-0.0625	-	0.017	-

Tot slot nog een

<u>Voorbeeld</u>

x	f(x)	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
0.5	1.64872				
		17340			
0.6	1.82212		1823		
		19163		193	
0.7	2.01375		2016		18
		21179		211	
0.8	2.22554		2227		24
		23406		235	
0.9	2.45960		2462		24
		25868		259	
1.0	2.71828		2721		26
		28589		285	
1.1	3.00417		3006		32
		31595		317	
1.2	3.32012		3323		
		34918			
1.3	3.66930				

Bereken f(0.94). We kiezen $x_0 = 0.9$, dus $p = 0.4$.

Newton

$$
\begin{aligned}
f_0 &= 2.45960 \\
\binom{p}{1}\Delta f_0 &= \quad 103472 \\
\binom{p}{2}\Delta^2 f_0 &= \quad -3265 \\
\binom{p}{3}\Delta^3 f_0 &= \quad 182 \\
\binom{p}{4}\Delta^4 f_0 &= \quad -13 \\
+\ \overline{} & \\
& \quad 2.559976 \\
\text{afgerond} &\quad 2.55998
\end{aligned}
$$

Gauss voorwaarts

$$
\begin{aligned}
f_0 &= 2.45960 \\
\binom{p}{1}\delta f_{\frac{1}{2}} &= \quad 103472 \\
\binom{p}{2}\delta^2 f_0 &= \quad -2954 \\
\binom{p+1}{3}\delta^3 f_{\frac{1}{2}} &= \quad -145 \\
\binom{p+1}{4}\delta^4 f_0 &= \quad 5 \\
+\ \overline{} & \\
& \quad 2.559978 \\
\text{afgerond} &\quad 2.55998
\end{aligned}
$$

De getabelleerde functie is e^x en er geldt $e^{0.94} = 2.55998$. We zien dat hier Gauss iets sneller convergeert dan Newton.

Opgave. Herhaal de berekening met Everett en Bessel.

6. Inverse interpolatie

Alle in hoofdstuk I behandelde methoden voor inverse interpolatie zijn uiteraard ook bij equidistante punten toepasbaar. We bespreken nog een alternatieve mogelijkheid, die we toelichten aan een voorbeeld, Zij gegeven de tabel van e^x uit het voorbeeld van § 5. Gevraagd wordt log(2.5) zo nauwkeurig mogelijk te berekenen.

De formule van Bessel (2.4.13) luidt:

$$
f^*(x_0 + ph) = f_0 + p\delta f_{\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) +
$$

$$
+ \frac{1}{3}(p - \tfrac{1}{2})\binom{p}{2}\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \tfrac{1}{2}\binom{p+1}{4}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \ldots \,. \tag{2.6.1}
$$

We nemen $x_0 = 0.9$. Bekend is $f^*(x_0 + ph) = 2.5$ en gevraagd wordt p. Formule (2.6.1) is een vergelijking in p en we schrijven deze in de vorm

$$
p = \frac{f^*(x_0+ph) - f_0 - \tfrac{1}{2}\binom{p}{2}(\delta^2 f_0+\delta^2 f_1) - \tfrac{1}{3}(p-\tfrac{1}{2})\binom{p}{2}\delta^3 f_{\frac{1}{2}} - \tfrac{1}{2}\binom{p+1}{4}(\delta^4 f_0+\delta^4 f_1) - \ldots}{\delta f_{\frac{1}{2}}} \tag{2.6.2}
$$

De nauwkeurigheid waarmee we p kunnen bepalen hangt af van de nauwkeurigheid van de opgegeven functiewaarden. De absolute nauwkeurigheid van de teller in (2.6.2) is ongeveer $\frac{1}{2}10^{-5}$. Dus p kunnen we met een absolute nauwkeurigheid van ongeveer $\frac{1}{2}10^{-5}/\delta f_{\frac{1}{2}} \approx 2 \times 10^{-5}$ bepalen. We nemen in de teller zoveel termen mee tot de bijdrage kleiner is dan 10^{-5}.
Een eerste benadering p_1 voor p volgt uit

$$p_1 = \frac{f^*(x_0 + ph) - f_0}{\delta f_{\frac{1}{2}}} = 0.15618 \; .$$

De term $\frac{1}{2}\binom{p+1}{4}(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1)$ is ongeveer 10^{-5}, dus deze nemen we nog mee.
Substitutie van de getabelleerde waarden levert

$$p = 0.15618 - 0.10018\binom{p}{2} - 0.00333(p - \tfrac{1}{2})\binom{p}{2} - 0.00097\binom{p+1}{4} \; . \qquad (2.6.3)$$

We lossen deze vergelijking als volgt op.
Een eerste benadering voor p is: $p_1 = 0.15618$. Een tweede benadering p_2 voor p volgt door p_1 in het rechterlid van (2.6.3) te substitueren. Dit levert

$$p_2 = 0.15618 - 0.10018 \times (-0.06589) - 0.00333 \times (0.02266) +$$

$$+ (-0.00097) \times (0.01171) = 0.16269 \; .$$

We herhalen dit nogmaals. Dit levert $p_3 = 0.16292$, waarna geen verandering meer optreedt. We vinden

$$\log(2.5) = 0.9 + 0.016292 = 0.916292 \; .$$

De absolute fout in p was ongeveer 2×10^{-5} de fout in $x_0 + ph$ is dus ongeveer 0.2×10^{-5}, dit betekent 6 significante decimalen.
Uit een tabel volgt $\log(2.5) = 0.916291$.

Opmerking. We zagen dat de absolute nauwkeurigheid voor p ongeveer $\varepsilon/\delta f_{\frac{1}{2}}$ is, als ε de absolute nauwkeurigheid van de functiewaarden is. Dit levert voor $x = x_0 + ph$ een absolute nauwkeurigheid die ongeveer $h \times \varepsilon/\delta f_{\frac{1}{2}} \approx \varepsilon/f'$. Dit is in overeenstemming met hetgeen in hoofdstuk I werd gevonden.

Hoofdstuk II Interpolatie bij gelijke intervallen

1. Gegeven:

x	cos x
5.1	0.3779777
5.2	0.4685167
5.3	0.5543743
5.4	0.6346929
5.5	0.7086698
5.6	0.7755659

Bereken cos 5.347 met een 3-, 4- en 5-punts formule van Lagrange.
Geef in elk geval een schatting van de restterm.

2. Maak een differentietabel bij de volgende gegevens. Geef de drie verschillende notaties van de vierde differenties.

$x_{-3} = 3.00$	20.0855369
$x_{-2} = 1$	.2873999
$x_{-1} = 2$	.4912917
$x_{0} = 3$	.6972326
$x_{1} = 4$	.9052432
$x_{2} = 5$	21.1153444
$x_{3} = 6$	.3275572

3. Gegeven is het polynoom

$$y = 2x^4 - 3x^3 + 5x^2 - 2x + 3 .$$

Bereken y voor x = 1.0(0.1)2.0 met behulp van een differentietabel.

4. Zoek de fouten in de volgende tabel en breng zo mogelijk correcties aan:

x	f(x)	x	f(x)
0.0	17278	1.0	79779
0.1	23424	1.1	86249
0.2	29585	1.2	92752
0.3	35764	1.3	99318
0.4	41964	1.4	105937
0.5	48818	1.5	112630
0.6	54440	1.6	119398
0.7	60723	1.7	126246
0.8	67041	1.8	133180
0.9	73398	1.9	140206

5. Gegeven:

x	sin x
1.0	0.84147
1.1	.89121
1.2	.93204
1.3	.96356
1.4	.98545
1.5	.99749
1.6	.99957
1.7	.99166
1.8	.97385

Bereken sin 1.04 met behulp van de formule van Newton-Gregory.
Bereken sin 1.22 met behulp van de formules van Everett en Bessel.

6. Gegeven:

x	sin x	δ^2	δ^4
0.9	0.78333	- 3123	125
1.1	0.89121	- 3553	141
1.3	0.96356	- 3842	155

Bereken sin x voor x = 1.00(0.02)1.06. Geef een schatting van de gemaakte fouten.

7. Bereken arcsin(0.8) met behulp van de tabel van opgave 6. Geef een schatting van de nauwkeurigheid van Uw antwoord.

8. Gegeven is dat de volgende tabel voor e^x onnauwkeurigheden bevat

x	e^x
0.1	1.105263
0.2	1.221815
0.3	1.350479
0.4	1.491162
0.5	1.649181
0.6	1.822272
0.7	2.014325

Wat kunt U zeggen over het aantal significante cijfers in de opgegeven functiewaarden?

Aanvulling Hoofdstuk II.

1. Gegeven de volgende tabellen:

x	sin(x)	cos(x)
1.0	0.841471	0.540302
1.1	0.891207	0.453596
1.2	0.932039	0.362358
1.3	0.963558	0.267499
1.4	0.985450	0.169967
1.5	0.997495	0.070737
1.6	0.999574	-0.029200
1.7	0.991665	-0.128844
1.8	0.973848	-0.227202
1.9	0.946300	-0.323290
2.0	0.909297	-0.416147

Maak voor sin(x) een differentietabel t/m de vierde differentie. Ga na of Uw resultaten in overeenstemming zijn met formule 2.2.5.
Maak ook voor sin(x) een differentietabel voor x = 1(0.2)2. Wat kunt U zeggen over het verband tussen overeenkomstige differenties?

2. Geef een uitdrukking van de formule $f_0 + 2f_1 + 2f_2 + f_3$ in voorwaartse differenties ten opzichte van x_0.

3. Bewijs de volgende identiteiten:

a) $$\sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{n}{k} = 0 .$$

Aanwijzing: gebruik de binomiumformule voor $(1 + x)^n$ voor geschikte waarde van x.

b) $$\binom{n}{k} \times \binom{k}{j} = \binom{n-j}{k-j} \times \binom{n}{j}$$

en bewijs met behulp hiervan de formule

$$f_{k+n} = \sum_{i=0}^{n} \binom{n}{i} \Delta^i f_k .$$

4. Leid met behulp van de voorwaartse en achterwaartse formule van Gauss een interpolatieformule af die symmetrisch is rond $x = x_0$.
(Dit is de interpolatieformule van Stirling.)
Gebruik in deze formule de notatie

$$\mu\delta f_n := \tfrac{1}{2}(\delta f_{n-\frac{1}{2}} + \delta f_{n+\frac{1}{2}}) \; .$$

5. Maak een zo groot mogelijke differentietabel uit de tabel van opgave 6 hoofdstuk II, en bereken sin(0.95) met behulp van de formule van Stirling (zie opgave 4).

6. Bewijs rechtstreeks de volgende

<u>Stelling</u>. Als $f(x)$ n maal continu differentieerbaar is op het interval $[x_0,x_n]$ dan is er een $\xi \in (x_0,x_n)$ zodanig dat

$$\Delta^n f_0 = h^n f^{(n)}(\xi) \; .$$

Hoofdstuk III. Numerieke Integratie

1. Inleiding

Het berekenen van $I := \int_a^b f(x)dx$ kan op de volgende manieren gedaan worden:

- analytisch; in sommige gevallen kan de primitieve functie van f bepaald worden, waarna I eenvoudig te berekenen is.
- numeriek; in de meeste gevallen is geen analytische aanpak mogelijk. Uitgaande van de definitie van de integraal:

$$\int_a^b f(x)dx := \lim_{\max_k \Delta x_k \to 0} \sum_{k=1}^{n} f(\xi_k)\Delta x_k$$

is het een voor de hand liggend idee om benaderingsformules (integratieformules) te maken van de vorm

$$\int_a^b f(x)dx = c_0\, f(x_0) + c_1\, f(x_1) + \ldots + c_n\, f(x_n) + R_n\,. \qquad (3.1)$$

Hierin zijn $x_0,x_1,\ldots,x_n$ punten uit het interval $[a,b]$. De coëfficiënten $c_0,c_1,\ldots,c_n$ hangen af van a,b en van x_0 t/m x_n maar niet van de functie f. R_n, de restterm van de integratieformule, is de fout die we maken als we de integraal vervangen door de som. Het probleem van de numerieke wiskunde is nu ten eerste om informatie te krijgen over de grootte van R_n en ten tweede om door geschikte keuze van c_0 t/m c_n, x_0 t/m x_n, de waarde van R_n onder gegeven omstandigheden zo klein mogelijk te maken.
Er bestaan zeer veel integratieformules van de vorm (3.1) die ieder hun eigen voordelen en nadelen hebben. Enkele daarvan zullen in dit hoofdstuk besproken worden.

2. Integratieformules van Newton-Cotes

De integratieformules van Newton-Cotes (gesloten type) verkrijgen we door de punten $x_0, x_1, \ldots, x_n$ equidistant te kiezen met $x_0 := a$ en $x_n := b$, vervolgens in de integraal f te vervangen door f^*, d.i. het interpolatiepolynoom op deze punten en tenslotte deze laatste integraal exact te berekenen.
Volgens Lagrange is

$$f(x) = f(x_0 + ph) = L_0(p)\cdot f_0 + L_1(p)\cdot f_1 + \ldots + L_n(p)\cdot f_n + R(p) \qquad (3.2)$$

zodat

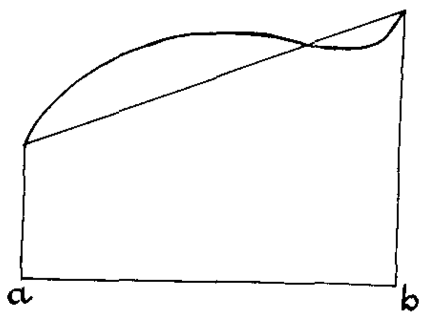
$$\int_a^b f(x)dx = h\int_0^n f(x_0 + ph)dp = c_0\, f_0 + c_1\, f_1 + \ldots + c_n\, f_n + R_n$$

met

$$f_i := f(x_i) \qquad\qquad c_i := h\int_0^n L_i(p)dp$$

$$R_n := h\int_0^n R(p)dp \qquad\qquad h := \frac{b-a}{n}\,.$$

Voor n = 1 krijgen we de meest simpele formule van dit type, de trapeziumregel.
We vervangen f door het eerste graads polynoom op de steunpunten $x_0 = a$ en $x_1 = b$. De integratieformule wordt dan



$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\,[f(a) + f(b)] + R_1\,.$$

Dit kunnen we direct uit de tekening aflezen, maar ook uit (3.2) afleiden.
Wat kunnen we zeggen van R_1? Uit de formule van Lagrange volgt

$$R_1 = -\int_a^b \frac{(x-a)(b-x)}{2}\, f''(t(x))dx\,.$$

Omdat $(x - a)(b - x) \geq 0$ voor alle $x \in [a,b]$, geldt volgens een bekende stelling (zie Wiskunde I, hoofdstuk II, § 1, eigenschap V)

$$\min_{x\in[a,b]} f''(x) \int_a^b \frac{(x-a)(b-x)}{2}\,dx \le \int_a^b \frac{(x-a)(b-x)}{2} f''(t(x))dx \le$$

$$\le \max_{x\in[a,b]} f''(x) \int_a^b \frac{(x-a)(b-x)}{2}\,dx \ .$$

Nu is

$$\int_a^b \frac{(x-a)(b-x)}{2}\,dx = \frac{1}{12}(b-a)^3$$

zodat

$$\int_a^b \frac{(x-a)(b-x)}{2} f''(t(x))dx = \frac{1}{12}(b-a)^3\cdot\eta$$

met

$$\min_{x\in[a,b]} f''(x) \le \eta \le \max_{x\in[a,b]} f''(x) \ .$$

Als $f''(x)$ continu is, dan is er een $\xi \in [a,b]$ zodat $\eta = f''(\xi)$ waarmee we de formule gevonden hebben

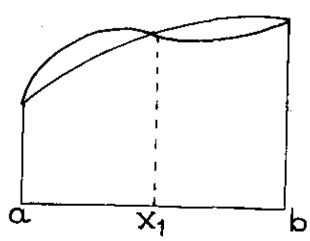
$$R_1 = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi) \ .$$

De trapeziumregel luidt nu als volgt

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] - \frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi) \ . \tag{3.3}$$

Hierbij is verondersteld dat f tweemaal continu differentieerbaar is.

Voor $n = 2$ krijgen we de regel van Simpson. We vervangen f door het tweedegraads polynoom f^* op de steunpunten $x_0 := a$, $x_1 := \frac{1}{2}(a+b)$, $x_2 := b$. Met $h = \frac{1}{2}(b-a)$ vinden we dan



$$f^*(x) = f^*(x_0+ph) = \frac{(p-1)(p-2)}{2} f_0 + \frac{p(p-2)}{-1} f_1 + \frac{p(p-1)}{2} f_2$$

waaruit volgt

$$\int_a^b f^*(x)dx = \frac{h}{3}\,[f_0 + 4f_1 + f_2]\ .$$

<u>Opgave</u>. Ga dit zelf na.

De restterm is in dit geval

$$R_2 = h^4 \int_0^2 \frac{p(p-1)(p-2)}{6}\, f'''(t_p)dp\ .$$

Omdat $p(p - 1)(p - 2)$ niet tekenvast is in het integratie-interval kunnen we niet, zoals bij de trapeziumregel, op eenvoudige wijze voor R_2 een soortgelijke formule afleiden.

Het is wel mogelijk, maar veel moeilijker, om te bewijzen dat geldt

$$R_2 = -\frac{h^5}{90}\, f^{(4)}(\xi)\ .$$

Als we dit accepteren dan vinden we voor de regel van Simpson de volgende formule:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\,[f(a) + 4f(\tfrac{a+b}{2}) + f(b)] - \frac{h^5}{90}\, f^{(4)}(\xi) \qquad (3.4)$$

met $h = \frac{1}{2}(b - a)$. Verondersteld is hierbij dat f viermaal continu differentieerbaar is.

Hieronder volgt een lijst van Newton-Cotes formules in een iets andere notatie:

$$n = 1 \qquad \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}\,(f_0 + f_1) - \frac{(x_1 - x_0)}{12}\, h^2\, f''(\xi)$$

$$n = 2 \qquad \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}\,(f_0 + 4f_1 + f_2) - \frac{(x_2 - x_0)}{180}\, h^4\, f^{(4)}(\xi) \qquad (3.5)$$

$$n = 3 \qquad \int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}\,(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) - \frac{x_3 - x_0}{80}\, h^4\, f^{(4)}(\xi)$$

$$n = 4 \qquad \int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) - \frac{2(x_4 - x_0)}{945} h^6 f^{(6)}(\xi) .$$

Dit zijn de formules van het zogenaamde gesloten type omdat de functiewaarden in de eindpunten x_0 en x_n in de formules voorkomen.

In de zogenaamde open type Newton-Cotes formules komen de functiewaarden in de eindpunten niet voor in de integratieformule. Voorbeelden hiervan zijn

$$n = 2 \qquad \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = 2h\, f_1 + \frac{x_2 - x_0}{6} h^2 f''(\xi)$$

$$n = 3 \qquad \int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{2}(f_1 + f_2) + \frac{(x_3 - x_0)}{4} h^2 f''(\xi) \qquad (3.6)$$

$$n = 4 \qquad \int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{4h}{3}(2f_1 - f_2 + 2f_3) + \frac{7(x_4 - x_0)}{90} h^4 f^{(4)}(\xi) .$$

De nauwkeurigheid van de trapeziumregel, of van de regel van Simpson, zal in het algemeen niet voldoende zijn. Om grotere nauwkeurigheid te krijgen zonder een ingewikkeldere integratieformule te gebruiken gaan we als volgt te werk.

. Voor de trapeziumregel:
We verdelen het interval (a,b) in n deelintervallen ter lengte $h := \frac{b - a}{n}$.
We passen op elk deelinterval de trapeziumregel toe, dus

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) - \frac{h^3}{12} f''(\xi_i) .$$

We tellen de bijdragen van alle deelintervallen bij elkaar op en krijgen dan de volgende <u>samengestelde integratieformule</u>

$$\int_a^b f(x)dx = h(\tfrac{1}{2}f_0 + f_1 + \ldots + f_{n-1} + \tfrac{1}{2}f_n) + R_n \qquad (3.7)$$

Wyzigingen. Cursus wetenschappelyk Rekenen A

Hoofdstuk III.

pag 6. regel 2 e.v.

$$R_n = -\frac{1}{12} h^2 \sum_{i=1}^{n-1} f''(\xi_i)\,(x_{i+1}-x_i). \qquad (3.7)$$

Omdat geldt

$$(b-a)\times \min_{x\in[a,b]} f''(x) \le \sum_{i=1}^{n-1} f''(\xi_i)\,(x_{i+1}-x_i) \le (b-a)\times \max_{x\in[a,b]} f''(x)$$

is er, als $f''(x)$ continu is, een ξ in $[a,b]$ zodanig dat.

$$R_n = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi)$$

pag 6 regel 7 (3.7) ofwel weg laten

pag 6. regel 4 van onder

met

$$R_{2n} = -\frac{h^4}{180} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_i)\,(x_{2i+2}-x_{2i})$$

ofwel

pag 5 regel 4 van onder.

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

pag 6 regel 9 van onder

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)\,dx = \frac{h}{3}(f_{2i} + 4f_{2i+1} + f_{2i+2}) - \frac{x_{2i+2}-x_{2i}}{180} h^4 f^{(4)}(\xi_i).$$

pag 5 laatste regel. (3.7) weg

met

$$R_n = -\frac{1}{12} h^3 \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) .$$

Omdat geldt

$$n \times \min_{x\in[a,b]} f''(x) \le \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) \le n \times \max_{x\in[a,b]} f''(x)$$

is er een ξ in $[a,b]$ zodanig dat

$$\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i) = n \times f''(\xi) .$$

De samengestelde trapeziumregel is derhalve (3.7) ofwel

$$\int_a^b f(x)dx = h(\tfrac{1}{2}f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \tfrac{1}{2}f_n) - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi) . \qquad (3.8)$$

Voor de regel van Simpson:
We verdelen (a,b) in $2n$ intervallen ter lengte $h := \frac{b-a}{2n}$. We passen de regel van Simpson toe op opeenvolgende tweetallen intervallen

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx = \frac{h}{3} (f_{2i} + 4f_{2i+1} + f_{2i+2}) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi_i) .$$

Op gelijksoortige wijze als bij de trapeziumregel vinden we dan voor de samengestelde regel van Simpson

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{2n-2} + 4f_{2n-1} + f_{2n}) + R_{2n} \qquad (3.9)$$

met

$$R_{2n} = -\frac{h^5}{90} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_i)$$

ofwel

$$R_{2n} = -\frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi) .$$

Opgave. Ga dit zelf na.

Een schatting van de nauwkeurigheid van de integratieformule, d.i. een schatting van de grootte van R_n, kunnen we op de volgende manier krijgen.

Voor de trapeziumregel:

Bereken $I_n := h(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n)$; bereken op analoge wijze, door (a,b) in $2n$ intervallen te verdelen, I_{2n}. Dan geldt

$$I = I_n + R_n$$

$$I = I_{2n} + R_{2n} \; . \qquad (3.10)$$

= iets anders dan op pag 6 staat.

Als nu f'' in elk deelinterval weinig varieert dan geldt bij benadering (zie ~~(3.7)):~~

$$R_{2n} = \tfrac{1}{4}R_n \; . \qquad (3.11)$$

Met behulp van (3.10) volgt hieruit voor R_{2n} de volgende schatting

$$R_{2n} = \frac{1}{3}(I_{2n} - I_n) + R_{2n}^{(1)} \; .$$

Nu we een schatting hebben voor R_{2n} kunnen we deze waarde ook in rekening brengen. We krijgen dan

$$I = I_{2n} + \frac{1}{3}(I_{2n} - I_n) + R_{2n}^{(1)} \qquad (3.12)$$

met de verwachting dat

$$|R_{2n}^{(1)}| \ll |R_{2n}| \; .$$

Deze methode om uit I_n en I_{2n} door extrapolatie een betere benadering voor I te krijgen wordt <u>h^2-extrapolatie van Richardson</u> genoemd. We gebruiken immers het feit dat de restterm bij benadering evenredig is met h^2.

Voor de regel van Simpson:

Bereken $I_n := \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$ met n is even, bereken vervolgens I_{2n}. Dan geldt weer (3.10).
Als nu $f^{(4)}$ in elk deelinterval weinig varieert dan geldt bij benadering (zie (3.9))

$$R_{2n} = \frac{1}{16} R_n \qquad (3.13)$$

en hieruit vinden we als schatting voor R_{2n}

$$R_{2n} = \frac{1}{15}(I_{2n} - I_n) + R_{2n}^{(2)} .$$

We brengen deze formule weer in rekening en krijgen dan

$$I = I_{2n} + \frac{1}{15}(I_{2n} - I_n) + R_{2n}^{(2)} . \qquad (3.14)$$

We spreken in dit geval van h^4-extrapolatie.

Voorbeeld

Berekening van $\int_0^1 e^x\,dx = 1.718281828$ met de trapeziumregel

n	I_n	I_{2n}	$\frac{1}{3}(I_{2n} - I_n)$	I_{extrap}
2	1.75393109	1.72722190	-0.00890306	1.71831884
4	1.72722190	1.72051859	223444	28415
6	1.72225749	1.71927609	099380	229
8	1.72051859	1.71884113	055915	197

n	R_n	R_{2n}	R_{2n}/R_n	$R_{2n}^{(1)}$
2	-0.035649	-0.008940	0.2508	$-0.37_{10}-4$
4	8940	2237	0.2502	$-0.23_{10}-5$
6	3976	0994	0.250	$-0.46_{10}-6$
8	2237	559	0.250	$-0.15_{10}-6$

Onderstaande procedure TRAP berekent met de trapeziumregel de waarde van $\int_a^b f(x)dx$, door successievelijk halveren van de stapgrootte.
Als beëindigingscriterium wordt gebruikt

$$\left|\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)\right| < \varepsilon .$$

Is aan deze voorwaarde voldaan dan wordt aan TRAP de waarde $T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$ gegeven. De fout in deze waarde als benadering voor de integraal zal in het algemeen veel kleiner zijn dan ε.
De berekening van T_{2n} uit T_n en de toegevoegde functiewaarden geschiedt zodanig, dat elke functiewaarde slechts één keer gebruikt wordt. Dit gaat als volgt:

Zij

$$T_n = h\left(\tfrac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} f(a + jh) + \tfrac{1}{2}f(b)\right)$$

$$M_n = h \sum_{j=1}^{n} f(a + \frac{2j - 1}{2} h) \ ,$$

dan is

$$T_{2n} = \tfrac{1}{2}(T_n + M_n) \ .$$

Opgave. Ga na dat M_n eveneens een benadering is voor de integraal met een in het voorafgaande genoemde integratieformule. Welke?

```
real procedure TRAP(x, fx, a, b, eps);
value a, b, eps; real x, fx, a, b, eps;
begin integer k, n; real h, Tn, Mn, Rn;
      n := 1; h := b - a;
      x := a; Tn := fx; x := b; Tn := 0.5 × h × (Tn + fx);
L:    n := 2 × n; h := h/2;      for n := 2, 2×n while abs(Rn) ≥ eps do
   begin
      Mn := 0;
      for k := 1 step 2 until n do
      begin x := a + k × h; Mn := Mn + fx end;
      Mn := 2 × h × Mn;
      Rn := (Mn - Tn)/6;
      Tn := (Tn + Mn)/2;
   end if abs(Rn) ≥ eps then goto L;
      TRAP := Tn + Rn
end TRAP;
```

Opgave. Ga na dat het niet zeker is dat dit proces eindig is, hetgeen een (ernstig) bezwaar is. Op welke wijze kunt U dit bezwaar ondervangen?

Opgave. Ga na dat deze procedure ook het juiste antwoord aflevert als a ≥ b.

3. Afleiding van integratieformules met de methode van de onbepaalde coëfficiënten

Uit de afleiding volgt dat de trapeziumregel exact is voor polynomen van de eerste graad. De regel van Simpson is exact voor polynomen van de tweede graad en blijkens de restterm ook voor polynomen van de derde graad.

We kunnen deze eigenschap ook gebruiken om integratieformules af te leiden. We behandelen als voorbeeld de regel van Simpson.
Stel

$$\int_{x_{-1}}^{x_1} f(x)dx = af_{-1} + bf_0 + cf_1 + R \ .$$

We bepalen a, b en c nu zo dat $R = 0$ voor polynomen van zo hoog mogelijke graad. Deze graad is tenminste 2. (Waarom?)

$$\begin{array}{lrcl} f(x) = 1 & 2h & = & a + b + c \\ f(x) = x & 0 & = & -ah + ch \\ f(x) = x^2 & \frac{2}{3}h^3 & = & ah^2 + ch^2 \ . \end{array}$$

De oplossing van dit stelsel is $a = c = \frac{1}{3}h$, $b = \frac{4}{3}h$.
De integratieformule is dus

$$\int_{x_{-1}}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_{-1} + 4f_0 + f_1) + R \ .$$

We nemen nu aan dat de restterm van de volgende vorm is

$$R = \mathcal{C}h^p f^{(q)}(\xi)$$

en bepalen vervolgens de waarden van $\mathcal{C}$, p en q.
Voor $f(x) = x^3$ vinden we ook nog $R = 0$. Hieruit volgt $q > 3$.
Voor $f(x) = x^4$ vinden we $R = -\frac{4}{15}h^5$. Hieruit volgt $q = 4$, $p = 5$ en
$\mathcal{C} = -\cancel{\frac{1}{180}}\ \frac{1}{90}$

Opgave. Leid op dezelfde manier de overige Newton-Cotes formules af.

4. Invloed van afrondingsfouten

In de integratieformule

$$I_n = \sum_{i=0}^{n} c_i \, f(x_i)$$

zijn de functiewaarden $f(x_i)$ in het algemeen slechts onnauwkeurig bekend. Stel de fout in $f(x_i)$ is ε_i. Tengevolge daarvan maken we bij de berekening van I_n ook een fout die we δI_n noemen, dan is

$$I_n + \delta I_n = \sum_{i=0}^{n} c_i (f(x_i) + \varepsilon_i) \ ,$$

dus

$$\delta I_n = \sum_{i=0}^{n} c_i \, \varepsilon_i$$

$$|\delta I_n| \le \max_i |\varepsilon_i| \cdot \sum_{i=0}^{n} |c_i| \ .$$

Voor iedere integratieformule die de functie $f(x) = 1$ exact integreert geldt

$$\sum_{i=0}^{n} c_i = b - a \ .$$

Maar dit zegt alleen iets over $\sum |c_i|$ als alle c_i hetzelfde teken hebben. Is dit het geval dan vinden we

$$|\delta I_n| \le |b - a| \max_i |\varepsilon_i| \ .$$

Dit is een zeer bevredigend resultaat. Formules waarbij niet geldt dat alle c_i hetzelfde teken hebben kunnen aanleiding geven tot aanzienlijk grotere fouten. Een voorbeeld hiervan is de Newton-Cotes formule voor $n \ge 9$.

5. Integratiemethode met automatisch variërende stapgrootte

In het voorgaande hebben we gezien dat we een integraal met een opgegeven nauwkeurigheid kunnen berekenen door bijv. de samengestelde trapeziumregel (3.8) te gebruiken met een voldoende kleine h.
Deze methode is in een aantal gevallen economisch niet verantwoord, namelijk in die gevallen waarin de integrand f niet overal even glad is in (a,b). De grootte van h wordt namelijk bepaald door het gedeelte van (a,b) waarin f het minst glad is. (We noemen f glad in een interval als f"(x) hierin klein is.)
We zullen nu een methode bespreken die tracht de grootte van h op deelintervallen aan te passen aan de gladheid van f.

Veronderstel dat we $\int_a^b f(x)dx$ willen berekenen met een fout die absoluut genomen kleiner is dan ε. Dan is de fout die we per lengte-eenheid op (a,b) mogen maken gelijk aan $\frac{\varepsilon}{b-a}$.
We starten met als schatting voor de stapgrootte de waarde h_0. We berekenen $\int_a^{a+h_0} f(x)dx$ met de trapeziumregel met stapgrootte h_0, uitkomst I_1, en met stapgrootte $h_0/2$, uitkomst I_2. De fout in I_2 is dan ongeveer gelijk aan

$$R(h_0) := \frac{1}{3}(I_2 - I_1) .$$

Tengevolge van de toegelaten fout per lengte-eenheid zullen we deze stap accepteren (en voor $\int_a^{a+h_0} f(x)dx$ de waarde $I_2 + \frac{1}{3}(I_2 - I_1)$ nemen) als geldt

$$|R(h_0)| \leq \frac{\varepsilon h_0}{b-a} . \qquad (3.15)$$

Geldt dit niet dan hebben we de stapgrootte blijkbaar te groot gekozen en moeten we opnieuw beginnen bij a. Geldt de ongelijkheid (3.15) wel dan gaan we verder bij $a + h_0$.

Hoe bepalen we in beide gevallen de nieuwe stapgrootte h_1 ? Daartoe merken we op dat de fout bij toepassing van de trapeziumregel ongeveer evenredig is met h^3 (zie (3.3)).
Dus ongeveer geldt

$$|R(h_0)| = Ah_0^3 \qquad |R(h_1)| = Ah_1^3 .$$

De waarde van h_1 moet nu zodanig zijn dat geldt (vergelijk (3.15))

$$|R(h_1)| \le \frac{\varepsilon h_1}{b - a}$$

ofwel

$$h_1^3 \le \frac{\varepsilon h_1}{(b - a)A} = \frac{\varepsilon h_1 h_0^3}{(b - a)|R(h_0)|}$$

$$h_1 \le h_0\left(\frac{\varepsilon h_0}{(b - a)|R(h_0)|}\right)^{\frac{1}{2}} . \tag{3.16}$$

We willen de waarde van h_1 liefst zo groot mogelijk nemen, maar om zeker te zijn dat hij geaccepteerd zal worden nemen we de waarde van h_1 iets kleiner dan het rechterlid van (3.16), bv.

$$h_1 = 0.9\ h_0\left(\frac{\varepsilon h_0}{(b-a)|R(h_0)|}\right)^{\frac{1}{2}} . \tag{3.17}$$

Op deze wijze kiezen we voor iedere volgende stap de (nagenoeg optimale) waarde van de stapgrootte zodat de vereiste nauwkeurigheid juist gehaald wordt. Aan het einde van het integratie-interval moet natuurlijk een laatste (niet optimale) stap gedaan worden om het interval vol te maken.

Opgave. Leid de formule (3.16) af voor het geval van de regel van Simpson.

Een ALGOL procedure gebaseerd op deze methode is de volgende.

```
real procedure TRAP AUTO(x, fx, a, b, eps, h);
value a, b, eps; real x, fx, a, b, eps, h;
begin real x0, f0, f1, x2, f2, I1, I2, R, int, eps1; boolean last;
      eps1 := eps/(b - a); int := 0;
      x := x0 := a; f0 := fx;
 L:   if x0 + h ≥ b then begin last := true; h := b - x0 end
                    else last := false;
      x := x0 + 0.5 × h; f1 := fx;
      x := x2 := x0 + h; f2 := fx;
      I1 := (f0 + f2)/2; I2 := (I1 + f1)/2;
      R := (f1 - I1)/6;
      if abs(R) < eps1 then begin int := int + h × (I2 + R);
                                  x0 := x2; f0 := f2; if last then goto END
                            end;
      h := 0.9 × h × sqrt(eps1/abs(R));
      goto L; if ¬ last then goto L;
END:  TRAP AUTO := int
end
```

Opgave. Ook dit proces is niet gegarandeerd eindig. Modificeer de procedure zo dat het proces zeker eindigt en toch in zoveel mogelijk gevallen het goede antwoord aflevert.

Opgave. Ga na of de procedure ook (goed) werkt als a ≥ b.

Opgave. De variabele eps1 is overbodig. Als in regel 3 de declaratie van eps1 wordt geschrapt~~, en in regel 4 de eerste statement wordt vervangen door eps := eps/(b - a),~~ dan verandert er in feite niets aan de procedure. Ga dit na.

~~en verder~~ in de procedure body eps1 wordt vervangen door eps,

6. Extrapolatiemethode van Romberg-Stiefel

Voor de trapeziumregel hebben we afgeleid dat de restterm ongeveer gelijk is aan Ch^2 (zie (3.8)). Op grond hiervan hebben we een schatting gevonden voor de restterm waardoor het mogelijk is uit twee trapeziumbenaderingen een betere benadering te maken voor de integraal.

Dit idee gaan we nu verder uitbreiden.

Men kan bewijzen dat voor de restterm van de trapeziumregel geldt

$$R_n = C_1\, h^2 + C_2\, h^4 + \ldots + C_{m-1}\, h^{2m-2} + O(h^{2m}) \tag{3.18}$$

als f tenminste 2m keer differentieerbaar is.

We accepteren deze formule hier zonder bewijs.

We berekenen de verbeterde waarde zoals op pag. 7, wat erop neerkomt dat de term met h^2 geëlimineerd wordt:

$$\begin{aligned} I &= I_n + C_1\, h^2 + C_2\, h^4 + C_3\, h^6 + \ldots \\ I &= I_{2n} + \tfrac{1}{4} C_1\, h^2 + \tfrac{1}{16} C_2\, h^4 + \tfrac{1}{64} C_3\, h^6 + \ldots \\ \hline I &= \frac{4I_{2n} - I_n}{3} + C_2'\, h^4 + C_3'\, h^6 + \ldots\,. \end{aligned} \tag{3.19}$$

In de volgende stap zal de term $C_2'\, h^4$ geëlimineerd worden; in de daarop volgende stap de term met h^6, etc. Om dit gemakkelijk te kunnen formuleren voeren we de volgende notatie in:

T_i := de trapeziumsom op een verdeling van (a,b) in 2^i deelintervallen.

Dan ziet (3.19) er als volgt uit:

$$\begin{aligned} I &= T_i + C_1\, h^2 + C_2\, h^4 + \ldots \\ I &= T_{i+1} + \tfrac{1}{4} C_1\, h^2 + \tfrac{1}{16} C_2\, h^4 + \ldots \\ \hline I &= \frac{4T_{i+1} - T_i}{3} + C_2'\, h^4 + C_3'\, h^6 + \ldots\,. \end{aligned}$$

De eerste geëxtrapoleerde waarde duiden we in het vervolg aan met T_i^1, dus

$$T_i^1 := \frac{4T_{i+1} - T_i}{3}\,.$$

De volgende extrapolatiestap is dan

$$I = T_i^1 + C_2' h^4 + C_3' h^6 + \ldots$$

$$I = T_{i+1}^1 + \frac{1}{16} C_2' h^4 + \frac{1}{64} C_3' h^6 + \ldots$$

$$I = \frac{16T_{i+1}^1 - T_i^1}{15} + C_3^2 h^6 + \ldots .$$

De algemene relatie is

$$T_i^{k+1} = T_{i+1}^k + \frac{1}{4^{k+1} - 1} (T_{i+1}^k - T_i^k) . \qquad (3.20)$$

Schema:

$$\begin{array}{llllll} T_0 = T_0^0 & & & & & \\ T_1 = T_1^0 & T_0^1 & & & & \\ T_2 = T_2^0 & T_1^1 & T_0^2 & & & \\ T_3 = T_3^0 & T_2^1 & T_1^2 & T_0^3 & & \\ T_4 = T_4^0 & T_3^1 & T_2^2 & T_1^3 & T_0^4 . & \end{array} \qquad (3.21)$$

Opgave. Ga na dat de tweede kolom uit dit schema, dus T_i^1, precies de benaderingen met de regel van Simpson oplevert.

Voorbeelden

1. Berekening van $\int_0^1 e^x \, dx = e - 1 \doteq 1.71828\ 18285.$

n	T_n^0	T_n^1	T_n^2	T_n^3	T_n^4
0	1.8591 4091				
1	1.7539 3109	1.7188 6115			
2	1.7272 2190	1.7183 1884	1.7182 8269		
3	1.7205 1859	1.7182 8415	1.7182 8184	1.7182 8183	
4	1.7188 4113	1.7182 8197	1.7182 8182	1.7182 8182	1.7182 8182

2. Berekening van $4\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \pi \doteq 3.14159\ 26536$

n	T_n^0	T_n^1	T_n^2	T_n^3	T_n^4
0	3				
1	3.1	3.1333 3333			
2	3.1311 7647	3.1415 6863	21 1765 3.1420 1098		
3	3.1389 8849	3.1415 9250	3.1415 9409	578 3.1415 87~~47~~	
4	3.1409 4161	3.1415 9265	3.1415 9266	3.1415 9264	3.1415 9266

Opmerkingen

1. Men kan bewijzen dat altijd, d.w.z. onafhankelijk van het feit of (3.18) geldt, voor iedere kolom uit schema (3.21) geldt: $\lim_{i\to\infty} T_i^k = \int_a^b f(x)dx$. Dit betekent dat het schema "safe" is.

2. De nauwkeurigheid van de benadering wordt in iedere volgende kolom beter zolang het aantal kolommen kleiner is dan m (zie (3.18)). In de praktijk zal men echter slechts een beperkt aantal (ca. 5 à 6) kolommen in het schema (3.21) nemen en zo nodig wel het aantal rijen vergroten.

3. In het voorgaande hebben we gezien dat de integratieformules met negatieve coëfficiënten onaantrekkelijk zijn (zie par. 4). Men kan bewijzen dat elke T_i^k een lineaire combinatie van functiewaarden is met positieve coëfficiënten.

4. Deze methode gebruikt een homogene stapgrootte en is dus alleen efficiënt als de functie om het gehele interval overal even glad is.

7. Integratieformules van Gauss

De tot nu toe behandelde integratieformules (van Newton-Cotes) zijn gebaseerd op een verdeling van (a,b) in gelijke intervallen. Men kiest een stel punten $x_0, x_1, \dots, x_n$ en bepaalt vervolgens de coëfficiënten $c_0, c_1, \dots, c_n$ zodanig dat de restterm R nul is voor polynomen van zo hoog mogelijke graad. Deze graad blijkt dan n of n+1 te zijn.

Men kan echter ook in de integratieformule

$$\int_a^b f(x)dx = C_0\, f(x_0) + C_1\, f(x_1) + \dots + C_n\, f(x_n) + R$$

zowel C_k als x_k als onbekenden beschouwen, waarvan de waarde bepaald moet worden zodanig dat R = 0 voor polynomen van zo hoog mogelijke graad. Omdat het aantal onbekenden nu 2n + 2 is, is deze graad tenminste 2n + 1.
Op deze wijze krijgt men de <u>integratieformules van Gauss</u>.

We behandelen als voorbeeld n = 2, en kiezen voor het gemak a = -1 en b = 1.

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = C_0\, f(x_0) + C_1\, f(x_1) + C_2\, f(x_2) + R\ .$$

De onbekenden C_k en x_k moeten voldoen aan de volgende vergelijkingen.

$$\begin{array}{ll}
f(x) = 1 & C_0 + C_1 + C_2 = 2 \\
f(x) = x & C_0\, x_0 + C_1\, x_1 + C_2\, x_2 = 0 \\
f(x) = x^2 & C_0\, x_0^2 + C_1\, x_1^2 + C_2\, x_2^2 = \frac{2}{3} \\
f(x) = x^3 & C_0\, x_0^3 + C_1\, x_1^3 + C_2\, x_2^3 = 0 \\
f(x) = x^4 & C_0\, x_0^4 + C_1\, x_1^4 + C_2\, x_2^4 = \frac{2}{5} \\
f(x) = x^5 & C_0\, x_0^5 + C_1\, x_1^5 + C_2\, x_2^5 = 0\ .
\end{array} \tag{3.22}$$

Dit is een stelsel van 6 vergelijkingen (niet lineair) met 6 onbekenden.
Door een kunstgreep kan dit stelsel vergelijkingen worden opgelost.
Daartoe voeren we drie nieuwe onbekenden α_0, α_1 en α_2 in, die de coëfficiënten zijn van het derde graads polynoom waarvan x_0, x_1 en x_2 de nulpunten

zijn. Dus

$$(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \equiv x^3 + \alpha_2 x^2 + \alpha_1 x + \alpha_0 . \qquad (3.23)$$

We vermenigvuldigen de eerste vergelijking van (3.22) met α_0, de tweede met α_1, de derde met α_2 en de vierde met 1, en tellen vervolgens deze vier vergelijkingen op. Dit geeft

$$2.\alpha_0 + 0.\alpha_1 + \frac{2}{3}\alpha_2 = 0 .$$

We doen hetzelfde met de 2e t/m 5e vergelijking en krijgen dan

$$0.\alpha_0 + \frac{2}{3}\alpha_1 + 0.\alpha_2 + \frac{2}{5} = 0 ,$$

en met de 3e t/m 6e vergelijking krijgen we

$$\frac{2}{3}\alpha_0 + 0.\alpha_1 + \frac{2}{5}\alpha_2 = 0 .$$

Door middel van de kunstgreep hebben we dus uit de niet lineaire vergelijkingen (3.22) en (3.23) het volgende stelsel lineaire vergelijkingen voor α_0, α_1, α_2 afgeleid:

$$\begin{aligned} 2.\alpha_0 \qquad\qquad + \frac{2}{3}\alpha_2 \qquad &= 0 \\ \frac{2}{3}\alpha_1 \qquad + \frac{2}{5} &= 0 \\ \frac{2}{3}\alpha_0 \qquad\qquad + \frac{2}{5}\alpha_2 \qquad &= 0 . \end{aligned}$$

De oplossing hiervan is $\alpha_0 = 0$, $\alpha_1 = -\frac{3}{5}$, $\alpha_2 = 0$. Het polynoom (3.23) is dus $x^3 - \frac{3}{5}x$ en de nulpunten hiervan zijn

$$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}} , \quad x_1 = 0 , \quad x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}} .$$

Tenslotte bepalen we C_0, C_1 en C_2 uit (3.22):

$$\begin{aligned} C_0 + C_1 + \qquad C_2 &= 2 \\ -\sqrt{\frac{3}{5}}\,C_0 \qquad + \sqrt{\frac{3}{5}}\,C_2 &= 0 \\ \frac{3}{5}C_0 \qquad + \quad \frac{3}{5}C_2 &= \frac{2}{3} \end{aligned}$$

en we vinden

$$C_0 = \frac{5}{9}\,, \quad C_1 = \frac{8}{9}\,, \quad C_2 = \frac{5}{9}\,.$$

De drie-punts integratieformule van Gauss luidt nu als volgt

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \frac{5}{9}\, f(-\sqrt{\tfrac{3}{5}}) + \frac{8}{9}\, f(0) + \frac{5}{9}\, f(\sqrt{\tfrac{3}{5}}) + \frac{1}{15750}\, f^{(6)}(\xi)\,. \tag{3.24}$$

De restterm hebben we bepaald op dezelfde manier als in par. 3.

Opgave. Ga dit laatste zelf na.

Opgave. Leid de volgende twee-punts formule af

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = f(-\sqrt{\tfrac{1}{3}}) + f(\sqrt{\tfrac{1}{3}}) + \frac{1}{135}\, f^{(4)}(\xi)\,. \tag{3.25}$$

Een integratieformule van Gauss kan men gebruiken als basisformule in de methoden die in het voorafgaande zijn besproken, uitgaande van de trapeziumregel. Doet men dit in het bijzonder voor een samengestelde integratieformule met stap halveren, zoals beschreven op pag. 7 e.v., dan moet men wel bedenken dat bij halveren van de stapgrootte alle in de formule voorkomende functiewaarden berekend moeten worden. Hierdoor gaat het voordeel dat men een grotere graad van nauwkeurigheid haalt met hetzelfde aantal functiewaarden weer verloren.

Opmerking. Bij alle integratieformules van Gauss geldt dat de basispunten $x_0,\dots,x_n$ de nulpunten zijn van de zg. Legendre polynomen, en verder geldt dat de coëfficiënten $C_0,\dots,C_n$ positief zijn.

We behandelen nog een andere vorm van een integratieformule van Gauss. Zij te berekenen

$$\int_{0}^{\infty} e^{-x}\, f(x)dx\,.$$

We zoeken een integratieformule van de vorm

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x)dx = C_0 f(x_0) + C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2) + R \ .$$

We eisen dat deze formule exact is, d.w.z. dat R = 0, voor polynomen van zo hoog mogelijke graad. Dit geeft het volgende stelsel vergelijkingen (vgl. (3.22)):

$$\begin{aligned} C_0 + C_1 + C_2 &= 1 \\ C_0 x_0 + C_1 x_1 + C_2 x_2 &= 1 \\ C_0 x_0^2 + C_1 x_1^2 + C_2 x_2^2 &= 2 \\ C_0 x_0^3 + C_1 x_1^3 + C_2 x_2^3 &= 6 \\ C_0 x_0^4 + C_1 x_1^4 + C_2 x_2^4 &= 24 \\ C_0 x_0^5 + C_1 x_1^5 + C_2 x_2^5 &= 120 \ . \end{aligned} \qquad (3.26)$$

Dit stelsel vergelijkingen lossen we met dezelfde kunstgreep op als (3.22). Het met (3.23) overeenkomende polynoom is in dit geval

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

De nulpunten hiervan moeten we numeriek bepalen, waarna we als oplossing voor (3.26) vinden, in 6 decimalen nauwkeurig:

$$x_0 = 0.415775 \quad x_1 = 2.294280 \quad x_2 = 6.289945$$

$$C_0 = 0.711093 \quad C_1 = 0.278518 \quad C_2 = 0.010389 \ .$$

Met meer theoretische beschouwingen kan men de formule voor de restterm afleiden

$$R = \frac{1}{20} f^{(6)}(\xi) \ , \qquad \xi \geq 0 \ .$$

We merken nog op dat in het algemene geval de basispunten x_k de nulpunten zijn van de zg. Laguerre polynomen.

8. Slotopmerkingen

De formules die in dit hoofdstuk behandeld zijn gaan er van uit dat de integrand f een "nette" functie is, d.w.z. de zoveelste afgeleide van f is begrensd, c.q. varieert niet te veel, in het integratie-interval.
In een aantal gevallen is hieraan niet voldaan, nl. als f of een van zijn afgeleiden oneindig groot wordt in het integratie-interval. Men zegt dan dat f ter plaatse een singulariteit heeft. Voorbeelden hiervan zijn integralen van de vorm

$$\int_0^1 g(x)\log x \, dx \,, \qquad \int_0^1 x^\alpha \, g(x)dx \,, \qquad \alpha > -1$$

waarbij g wel een "nette" functie is.
Voor het verkrijgen van een nauwkeurig resultaat is het noodzakelijk dat men de singulariteit verwijdert.
Soms kan dat op een heel eenvoudige wijze. Voorbeelden hiervan zijn de volgende.

1. De integrand in $\int_0^1 \sqrt{x}\, g(x)dx$ heeft een singulariteit bij $x = 0$. Men kan deze geheel elimineren door de substitutie $x = t^2$. Hierdoor gaat de integraal over in $2\int_0^1 t^2 g(t^2)dt$.

2. De logarithmische singulariteit in $\int_0^1 \frac{\log x}{1 + x^2}\, dx$ kan men eenvoudig verwijderen door partiële integratie

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

De laatste integrand heeft geen singulariteit bij $x = 0$, maar moet wel met de nodige zorg berekend worden in de buurt van $x = 0$, bv. met de reeksontwikkeling.

Hoofdstuk III Numerieke integratie

Gegeven

x	e^x	x	e^x
0.0	1.000000	0.9	2.459603
0.1	1.105171	1.0	2.718282
0.2	1.221403	1.1	3.004166
0.3	1.349859	1.2	3.320117
0.4	1.491825	1.3	3.669297
0.5	1.648721	1.4	4.055200
0.6	1.822119	1.5	4.481689
0.7	2.013753	1.6	4.953032
0.8	2.225541		

1. Bereken $\int_0^{1.2} e^x dx$ met de trapeziumregel en de regel van Simpson (formules van Newton-Cotes). Geef bij elk resultaat op twee manieren een schatting van de fout

   a) door gebruik te maken van de formule van de restterm,

   b) door de benaderingssom te berekenen voor twee waarden van h.

   Vergelijk de uitkomsten met de uit de tabel af te lezen waarde van de integraal.

2. Bewijs de formule

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx = hf_0 + \tfrac{1}{2}h^2 f'(\xi) \; , \tag{1}$$

   waarin $x_0 < \xi < x_0+h$.

   Bedenk een extrapolatieformule om uit een benadering met stapgrootte h en een met stapgrootte h/2 een betere benadering te berekenen.

   Bereken $\int_1^2 \frac{dx}{x}$ met formule (1) met $h = 0.2$ en $h = 0.1$. Geef een schatting van de fout en pas extrapolatie toe.

3. Zij gevraagd $\int_0^2 f(x)dx$ in 6 decimalen nauwkeurig te berekenen met behulp van de trapeziumregel.

   a) Wat is dan een geschikte waarde voor de stapgrootte h in het geval dat $f(x) = \log(1 + x)$, resp. $f(x) = \sin x$?

   b) In hoeveel decimalen moet $f(x)$ berekend worden?

   Dezelfde vragen voor de regel van Simpson.

4. Bepaal een integratieformule van de vorm

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)dx = 4h[af_{-2} + bf_0 + cf_1] + R ,$$

   zodanig dat $R = 0$ voor polynomen van zo hoog mogelijke graad.
   Veronderstel dat R geschreven kan worden als

$$R = Ch^p f^{(q)}(\xi) .$$

   Bepaal C, p en q.
   Gebruik de formule om met behulp van bovenstaande gegevens $\int_0^{1.6} e^x dx$ zo nauwkeurig mogelijk te berekenen. Pas daarbij ook Richardson-extrapolatie toe.

5. Gegeven de volgende integratieformule

$$\int_{x_0}^{x_0+6h} f(x)dx = \frac{3h}{10}[f_0 + 5f_1 + f_2 + 6f_3 + f_4 + 5f_5 + f_6] + R .$$

   Voor polynomen van welke graad geldt $R = 0$?
   Veronderstel dat $R = Ch^p f^{(q)}(\xi)$, bepaal dan C, p en q.

6. Bereken $\int_0^1 \frac{x^2 dx}{\sqrt{1 + x^2}}$ in 4 decimalen nauwkeurig met de methode van Romberg-Stiefel.
   Bereken ook de exacte waarde van de integraal.

7. Bereken $\int_0^{0.64} \frac{dx}{1 + \sqrt{x} + x^2}$ in 5 decimalen nauwkeurig.

8. Bereken $\int_1^2 \frac{dx}{x}$ in 5 decimalen nauwkeurig, met behulp van de driepuntsformule van Gauss.

9. a) Schrijf een procedure

   <u>real</u> <u>procedure</u> Simpson (x,fx,a,b,eps,h)

   voor het berekenen van $\int_a^b f(x)dx$ met een absolute fout kleiner dan eps.

   Methode:

   Gebruik de regel van Simpson.

   De stapgrootte wordt als volgt vastgesteld.

   Stel, de integratie is gevorderd tot het punt x_0, d.w.z. $\int_a^{x_0} f(x)dx$ is berekend. Stel dat h een zekere waarde heeft.

   Bereken $\int_{x_0}^{x_0+2h}$ met stapgrootte h en met stapgrootte $\frac{1}{2}$h.

   Bereken hieruit een schatting voor de fout.

   Als de fout te groot is, dan wordt de waarde van h gehalveerd.

   Als de fout voldoende klein is, dan wordt de berekende waarde van $\int_{x_0}^{x_0+2h}$ geaccepteerd.

   Voor de volgende integratiestap wordt h als volgt vastgesteld.

   Als de laatste waarde van h niet verkregen is door halvering dan wordt h verdubbeld; in het andere geval wordt h niet gewijzigd.

   De eerste waarde van h wordt als actuele parameter meegegeven.

   Als $x_0+2h > b$, dan wordt genomen $h := (b - x_0)/2$.

   b) Schrijf een programma waarin de procedure Simpson wordt aangeroepen.

   Test de procedure met enkele functies.

Aanvulling Hoofdstuk III

1. Gegeven is de functie $f(x)$ door

x	f(x)	x	f(x)
0.90	1.433086	1.25	1.888424
0.95	1.486225	1.30	1.970914
1.00	1.543081	1.35	2.058333
1.05	1.603794	1.40	2.150898
1.10	1.668519	1.45	2.248842
1.15	1.737415	1.50	2.352410
1.20	1.810656		

Bereken zo nauwkeurig mogelijk $\int_{0.9}^{1.5} x f'(x)dx$.

2. Bereken $\int_0^2 \frac{x+1}{\sqrt{x^2+1}} dx$ in 5 decimalen nauwkeurig.

3. a) Bepaal de integratieformule van de vorm

$$\int_0^h f(x)dx = h[af_0 + bf_1 + cf_0' + df_1'] + Ch^{p+1}f^{(p)}(\xi) ,$$

met een zo hoog mogelijke waarde van p.
In de formule is $f_0 = f(0)$, $f_1 = f(h)$, $f_0' = f'(0)$, $f_1' = f'(h)$.
Voor polynomen van welke graad geeft de uitdrukking $h[af_0 + bf_1 + cf_0' + df_1']$ de exacte waarde van de integraal?

b) Bepaal met behulp van de formule uit a) een integratieformule van de vorm

$$\int_0^1 f(x)dx = \sum_{j=0}^{N} \alpha_j f_j + \beta f_0' + \gamma f_N' + R$$

(met $f_j = f(j/N)$, $f_j' = f'(j/N)$.

4. Maak voor $\int_0^1 \sqrt{x}\, dx$ een Romberg schema.

Ga na op welke wijze de verschillende kolommen convergeren, en geef hiervoor een verklaring.

5. Beschrijf een methode om $\int_0^1 f(x)\log x\,dx$ numeriek te berekenen,

a) als $f(x) = \cos x$ of $f(x) = e^x$,

b) als $f(x)$ continu differentieerbaar is en de afgeleide is wel/niet bekend.

Wat kunt U in elk van de gevallen zeggen van de nauwkeurigheid.

6. Bereken $\int_0^\infty \frac{dx}{1+x^4}$ in 5 decimalen nauwkeurig.

7. Bepaal een integratieformule van de vorm

$$\int_0^1 f(x)\frac{dx}{\sqrt{x(1-x)}} = \alpha_1 f(0) + \alpha_2 f(\tfrac{1}{2}) + \alpha_3 f(1)$$

die exact is voor polynomen van zo hoog mogelijke graad.
Gebruik deze formule voor de berekening van

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x-x^3}} .$$

8. In de integratieformule

$$\int_{-1}^1 (a-x)f(x)dx = A_{-1}f(x_{-1}) + A_0 f(0) + A_1 f(x_1) + R$$

zijn de coëfficiënten A_{-1}, A_0 en A_1 afhankelijk van a. De restterm is van de vorm $R = cf^{(k)}(\xi)$.

Bepaal A_{-1}, A_0, A_1, x_{-1} en x_1 zo dat $R = 0$ voor polynomen van een zo hoog mogelijke graad.
Bepaal de waarde van c en k.

Hoofdstuk IV. Numerieke Differentiatie

1. Differentieformules

Als van een functie f een afgeleide niet analytisch voorhanden is dan kunnen we de waarde van deze afgeleide in het punt x_0 als volgt benaderen. Door een aantal steunpunten in de buurt van x_0 leggen we een interpolatiepolynoom en we nemen de afgeleide van dit polynoom als benadering voor de afgeleide van f.

Bijvoorbeeld wordt de eerste afgeleide van f in x_0 als volgt benaderd. Neem als steunpunten $x_{-1} := x_0 - h$, x_0, $x_1 := x_0 + h$. Het tweede graads interpolatiepolynoom (van Stirling) op deze punten is

$$p(x) = f_0 + \frac{x - x_0}{h}\mu\delta f_0 + \frac{(x - x_0)^2}{2h^2}\delta^2 f_0 . \tag{4.1}$$

Dan geldt

$$p'(x_0) = \frac{1}{h}\mu\delta f_0 = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} .$$

Voor de afgeleide van f gebruiken we daarom de formule

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\mu\delta f_0 + R .$$

De restterm R kunnen we berekenen met de reeksontwikkeling van Taylor

$$\begin{aligned}
f_1 &= f_0 + hf_0' + \frac{h^2}{2}f_0'' + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1) \\
f_{-1} &= f_0 - hf_0' + \frac{h^2}{2}f_0'' - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2) \\
\hline
f_1 - f_{-1} &= 2hf_0' + \frac{h^3}{6}\{f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\} .
\end{aligned}$$

Hieruit volgt

$$f'(x_0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(\xi) , \tag{4.2}$$

dus

$$R = -\frac{h^2}{6}f'''(\xi) \quad \text{met} \quad x_{-1} < \xi < x_1 .$$

Voor de tweede afgeleide krijgen we als we weer uitgaan van (4.1):

$$p''(x_0) = \frac{1}{h^2}\,\delta^2 f_0 = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}$$

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\,\delta^2 f_0 - \frac{h^2}{12}\,f^{(4)}(\xi) \; . \tag{4.3}$$

<u>Opgave</u>. Verifieer de restterm in deze laatste formule met behulp van Taylor.

Als we een interpolatiepolynoom van hogere graad nemen dan vinden we

$$\begin{aligned} hf'(x_0) &= \mu\delta f_0 - \frac{1}{6}\,\mu\delta^3 f_0 + \frac{1}{30}\,h^5 f^{(5)}(\xi) \\ h^2 f''(x_0) &= \delta^2 f_0 - \frac{1}{12}\,\delta^4 f_0 + \frac{1}{90}\,h^6 f^{(6)}(\xi) \; . \end{aligned} \tag{4.4}$$

<u>Opgave</u>. Verifieer deze formules.

<u>Opmerking</u>. Bovenstaande formules geven benaderingen voor de afgeleide in een basispunt. Als we de afgeleide willen berekenen in een punt $x_{\frac{1}{2}}$ midden tussen de twee basispunten x_0 en x_1 dan kunnen we beter uitgaan van de interpolatieformule van Bessel

$$p(x) = f_0 + \frac{x - x_0}{h}\,\delta f_{\frac{1}{2}} + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{4h^2}\,(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) + \ldots \; .$$

We vinden dan voor de eerste en de tweede afgeleide

$$\begin{aligned} hf'(x_{\frac{1}{2}}) &= \delta f_{\frac{1}{2}} - \frac{1}{24}\,\delta^3 f_{\frac{1}{2}} + \frac{3}{640}\,\delta^5 f_{\frac{1}{2}} - \ldots \\ h^2 f''(x_{\frac{1}{2}}) &= \tfrac{1}{2}(\delta^2 f_0 + \delta^2 f_1) - \frac{5}{48}\,(\delta^4 f_0 + \delta^4 f_1) + \ldots \; . \end{aligned} \tag{4.5}$$

<u>Opgave</u> (4.4)

$$f(x_0 + sh) = f_0 + s\,\mu\delta f_0 + \frac{s^2}{2}\,\delta^2 f_0 + \frac{s(s^2-1)}{3!}\,\mu\delta^3 f_0 + \frac{s^2(s^2-1)}{4!}\,\delta^4 f_0 + \ldots$$

formule van Stirling

$$f'(x_0 + sh) = \mu\delta f_0 + s\,\delta^2 f_0 + \frac{3s^2-1}{6}\,\mu\delta^3 f_0 + \frac{4s^3 - 2s}{24}\,\delta^4 f_0 + \ldots$$

$$f''(x_0 + sh) = \delta^2 f_0 + s\,\mu\delta^3 f_0 + \frac{12s^2 - 2}{24}\,\delta^4 f_0 + \ldots$$

2. Methode van de onbepaalde coëfficiënten

In bovenstaande formules voor numerieke differentiatie kunnen we de differenties uitdrukken in de functiewaarden op de basispunten. De formules (4.4) gaan dan over in

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= \frac{1}{12h}(f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2) + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi) \\
f''(x_0) &= \frac{1}{12h^2}(- f_{-2} + 16f_{-1} - 30f_0 + 16f_1 - f_2) + \frac{h^4}{90} f^{(6)}(\xi) \; .
\end{aligned}
\qquad (4.6)
$$

We kunnen meer algemeen differentiatieformules, uitgedrukt in functiewaarden, afleiden op dezelfde manier als in hoofdstuk III, par. 3, integratieformules zijn afgeleid. We behandelen als voorbeeld de eerste formule van (4.6).

We stellen daartoe

$$f'(x_0) = af_{-2} + bf_{-1} + cf_0 + df_1 + ef_2 + R \; .$$

De coëfficiënten moeten nu zodanig bepaald worden dat de formule exact is (d.w.z. $R = 0$) voor polynomen van zo hoog mogelijke graad. We nemen voor het gemak $x_0 = 0$, en krijgen dan het volgende stelsel:

$$
\begin{array}{llrcccc}
f(x) = 1 & 0 = & a + & b + & c + & d + & e \\
x & 1 = & -2h\,a & -h\,b & & +h\,d & +2h\,e \\
x^2 & 0 = & 4h^2a & +h^2b & & +h^2d & +4h^2e \\
x^3 & 0 = & -8h^3a & -h^3b & & +h^3d & +8h^3e \\
x^4 & 0 = & 16h^4a & +h^4b & & +h^4d & +16h^4e \; .
\end{array}
$$

De oplossing hiervan is $a = - e = \frac{1}{12h}$, $b = - d = - \frac{8}{12h}$, $c = 0$.

De restterm kunnen we in dit geval vinden met behulp van de reeksontwikkeling van Taylor, maar ook door te stellen

$$R = Ch^p f^{(q)}(\xi) \; .$$

Doen we dit laatste, dan vinden we

$$f(x) = x^5 \qquad 0 = - 4h^4 + R \; ,$$

waaruit volgt $q = 5$, $p = 4$, $C = \frac{1}{30}$.

Opgave. Leid op dezelfde manier de volgende formules af:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}(-25f_0 + 48f_1 - 36f_2 + 16f_3 - 3f_4) + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}(-3f_{-1} - 10f_0 + 18f_1 - 6f_2 + f_3) - \frac{h^4}{20} f^{(5)}(\xi)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}(-f_{-3} + 6f_{-2} - 18f_{-1} + 10f_0 + 3f_1) - \frac{h^4}{20} f^{(5)}(\xi)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}(3f_{-4} - 16f_{-3} + 36f_{-2} - 48f_{-1} + 25f_0) + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi) .$$

3. De invloed van afrondingsfouten

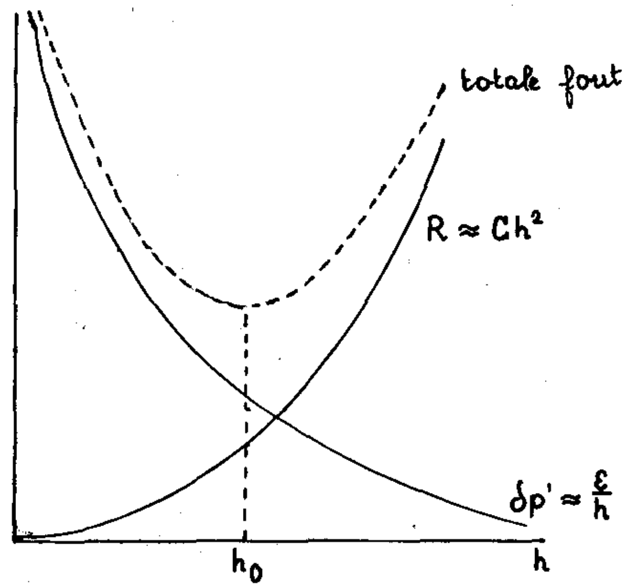
Tengevolge van het feit dat de functiewaarden niet exact bekend zijn, zal de berekende waarde voor de afgeleide ook een afrondingsfout bevatten. De invloed van afrondingsfouten bij numerieke differentiatie is veel groter dan bij numerieke integratie.

We behandelen als voorbeeld: formule (4.2).

Stel de afrondingsfout in f_{-1}, resp. f_1, is gelijk aan ε_{-1}, resp. ε_1.

Tengevolge daarvan heeft $p'(x_0)$ een fout

$$\delta p_0' = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{-1}}{2h} \approx \frac{\varepsilon}{h} .$$



We zien dus dat bij kleiner wordende h de afbreekfout kleiner wordt maar de invloed van de afrondingsfout in f(x) steeds groter wordt.
Er is een optimale waarde van h waarvoor de totale fout zo klein mogelijk is (zie tekening).

Voorbeeld

Gevraagd de afgeleide te bepalen van $f(x) = \log x$ in het punt $x = 3$.
We gebruiken formule (4.2) en formule (4.4). Het resultaat noemen we p_2', resp. p_4'.

$h = 0.5$	x	log x	$p_2'(3)$	$p_4'(3)$
	2.5	0.91629		
	3.0	1.09861	0.33647	0.33310
	3.5	1.25276		
$h = 0.1$	2.9	1.06471	0.33345	0.33333
	3.1	1.13140		
$h = 0.01$	2.99	1.09527	0.33350	0.33350
	3.01	1.10194		
$h = 0.001$	2.999	1.09828	0.33500	0.33583
	3.001	1.09895		

Hoofdstuk IV Numerieke differentiatie.

1. Van een functie $y = f(x)$ is onderstaande tabel gegeven:

x	f(x)
0.00	1.570796
0.05	1.520775
0.10	1.470629
0.15	1.420228
0.20	1.369438
0.25	1.318116
0.30	1.266104
0.35	1.213225
0.40	1.159279
0.45	1.104031
0.50	1.047198

Bepaal de afgeleide van $f(x)$ in $x = 0.3$ in 5 decimalen.

2. a) Bepaal een differentiatieformule van de vorm

$$f''(x_0) = af_0 + bf_{-1} + cf_{-2} + df_{-3} + R,$$

zodanig dat $R = 0$ voor polynomen van zo hoog mogelijke graad.
Veronderstel dat R geschreven kan worden als

$$R = Ch^p f^{(q)}(\xi),$$

bepaal dan C, p en q.

b) Zij gegeven de volgende tabel van $f(x) = \log(x)$.

x	f(x)	x	f(x)
1.00	0	1.26	0.2311
1.02	0.0198	1.28	0.2469
1.04	0.0392	1.30	0.2624
1.06	0.0583	1.32	0.2776
1.08	0.0770	1.34	0.2927
1.10	0.0953	1.36	0.3075
1.12	0.1133	1.38	0.3221
1.14	0.1310	1.40	0.3365
1.16	0.1484	1.42	0.3507
1.18	0.1655	1.44	0.3646
1.20	0.1823	1.46	0.3784
1.22	0.1989	1.48	0.3920
1.24	0.2151	1.50	0.4055

Bereken met behulp van de formule onder a) $f''(1.5)$ zo nauwkeurig mogelijk. Probeer daartoe een geschikte waarde voor h te voorspellen en vergelijk het resultaat ook met het resultaat voor andere waarden van h.

3. Gegeven:

x	$\int_{\infty}^{x} \frac{\cos t}{t}\, dt$	x	$\int_{\infty}^{x} \frac{\cos t}{t}\, dt$
10.6	−0.0823681	11.4	824019
10.7	855481	11.5	785705
10.8	878094	11.6	740148
10.9	891465	11.7	687925
11.0	895631	11.8	629667
11.1	890717	11.9	566052
11.2	876935	12.0	497800
11.3	854578		

a) Bereken uit deze tabel cos 11.7 in 5 decimalen.

b) Bepaal het punt waar $\int_{\infty}^{x} \frac{\cos t}{t}\, dt$ in het interval $10.6 \le x \le 12$ minimaal is.

Hoofdstuk V. Differentiaalvergelijkingen en differentievergelijkingen

1. Inleiding

Een differentiaalvergelijking is een vergelijking van de volgende vorm:

$$F(y^{(n)},y^{(n-1)},\dots,y',y,x) = 0 \ . \tag{5.1}$$

De orde van de hoogste afgeleide in de vergelijking noemen we de orde van de differentiaalvergelijking.

Het oplossen van een differentiaalvergelijking is het bepalen van een functie $y(x)$ die tenminste n keer differentieerbaar is en die samen met zijn afgeleiden voldoet aan de vergelijking (5.1).

In Wiskunde II, hoofdstuk VI, is behandeld het geval van de lineaire, n-de orde differentiaalvergelijking met constante coëfficiënten:

$$F(y^{(n)},y^{(n-1)},\dots,y',y,x) \equiv y^{(n)} + c_1\, y^{(n-1)} + \dots + c_{n-1}\, y' + c_n\, y + f(x) \ .$$

Van deze differentiaalvergelijking kan de algemene oplossing exact bepaald worden.

We zullen in dit hoofdstuk nog enkele andere typen van differentiaalvergelijkingen bespreken die exact opgelost kunnen worden. Daarbij zullen we ons in hoofdzaak bezig houden met differentiaalvergelijkingen van de eerste orde.

In het geval van een eerste orde differentiaalvergelijking kunnen we een meetkundige interpretatie geven aan de differentiaalvergelijking en zijn oplossingen.

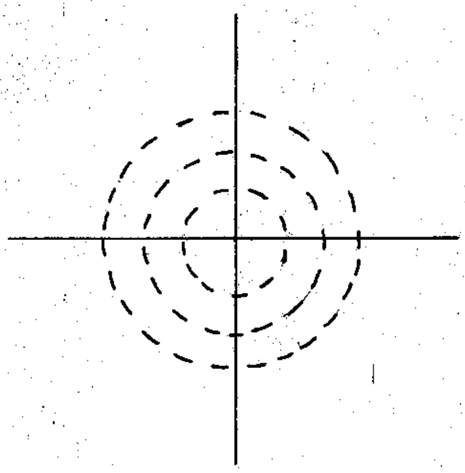
De algemene gedaante van een eerste orde differentiaalvergelijking is $F(y',y,x) = 0$. We denken ons deze vergelijking opgelost naar y'

$$y' = f(x,y) \ . \tag{5.2}$$

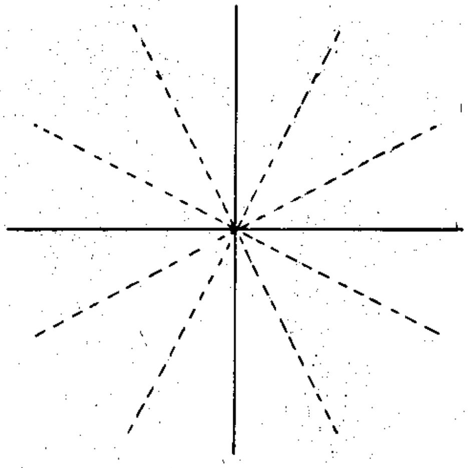
Nu is de meetkundige betekenis van de afgeleide de tangens van de hoek die de raaklijn aan de kromme $y = y(x)$ in het punt (x,y) maakt met de positieve x-as. Dus (5.2) definieert in het (x,y)-vlak een richtingsveld; aan elk punt (x,y) wordt de richting $f(x,y)$ toegevoegd.

Voorbeelden

$$y' = -\frac{x}{y}$$



$$y' = \frac{y}{x}$$

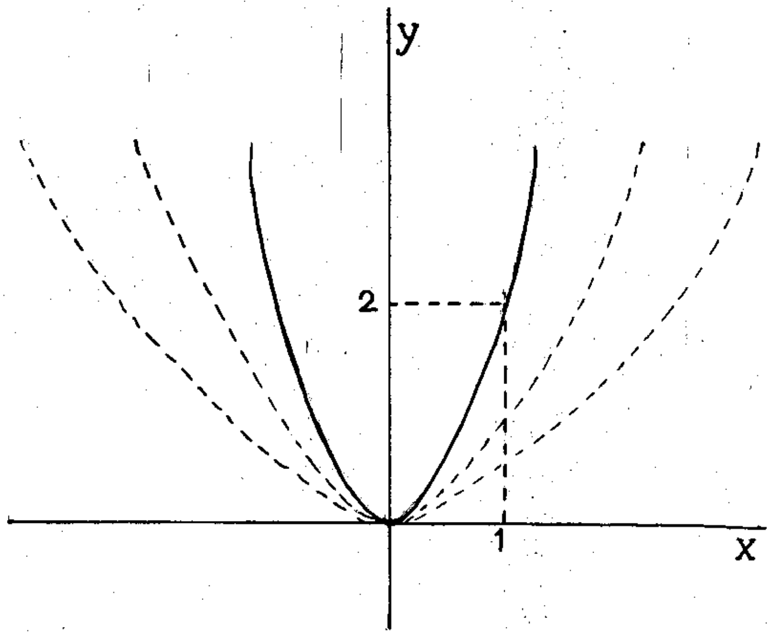


Een oplossing van de differentiaalvergelijking is nu een kromme die in elk punt bij het richtingsveld past, d.w.z. een kromme waarvan de raaklijn in elk punt de richting van het richtingsveld heeft.
Als het richtingsveld aan bepaalde eisen voldoet dan gaat door ieder punt precies één oplossingskromme, een zg. integraalkromme.

Als we de algemene oplossing van (5.2) gevonden hebben in de gedaante $\varphi(x,y,c) = 0$, met c een willekeurige constante, dan kunnen we de oplossing door een bepaald punt (x_0,y_0) vinden door c te bepalen uit de vergelijking $\varphi(x_0,y_0,c) = 0$.

Voorbeeld

$$y' = \frac{2y}{x}$$



Hiervan is de algemene oplossing: $y = cx^2$. Willen we nu de oplossing hebben voor het punt (1,2), dan moeten we $c = 2$ kiezen.

Opmerking. Het punt (0,0) is in dit geval een bijzonder punt, omdat alle oplossingen door dit punt gaan.

2. Scheiding van de variabelen

Stel (5.2) heeft de speciale vorm

$$y' = f(x)\cdot g(y) .$$

Dan is

$$\frac{y'}{g(y)} = f(x) \Rightarrow \int \frac{dy}{g(y)} = \int f(x)dx .$$

Voorbeelden

$y' = -2xy^2$ heeft als oplossing $y = \dfrac{1}{x^2 + c}$;

$x + yy' = 0$ heeft als oplossing $x^2 + y^2 = c$;

$y - xy' = 0$ heeft als oplossing $y = cx$;

$2y - xy' = 0$ heeft als oplossing $y = cx^2$.

3. Exacte differentiaalvergelijkingen

Een stel krommen kan gegeven zijn door

$$F(x,y) = c , \tag{5.3}$$

bij elke c behoort één kromme. Door differentiatie naar x volgt dan

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} y' = 0 . \tag{5.4}$$

Dit is een differentiaalvergelijking van het type

$$P(x,y) + Q(x,y)y' = 0 . \tag{5.5}$$

We weten dat de algemene oplossing van (5.4) gegeven is door (5.3). Nu geldt $\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 F}{\partial y \partial x}$ voor een "nette" F, dus een eigenschap van de functies P en Q uit (5.5) is in dit geval

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial x} . \tag{5.6}$$

Een differentiaalvergelijking van het type (5.5), waarbij P en Q voldoen aan (5.6) heet een <u>exacte differentiaalvergelijking</u>.
We zullen nu voor een dergelijke differentiaalvergelijking de algemene oplossing van de gedaante (5.3) trachten te vinden. We doen dit aan de hand van enkele voorbeelden.

<u>Voorbeeld</u>. Bepaal de algemene oplossing van

$$x^2 + y^2 + 2xyy' = 0 \ .$$

De differentiaalvergelijking is exact want met $P(x,y) = x^2 + y^2$ en $Q(x,y) = 2xy$ geldt inderdaad (5.6).
Als $F(x,y) = C$ oplossing is van de differentiaalvergelijking, dan is

$$\frac{\partial F}{\partial x} = x^2 + y^2 \quad \text{dus} \quad F(x,y) = \frac{1}{3}x^3 + xy^2 + \varphi(y) \ .$$

We bepalen $\varphi(y)$, de integratieconstante, nu zodanig dat $\frac{\partial F}{\partial y} = 2xy$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = 2xy + \varphi'(y) \ , \quad \text{dus} \quad \varphi'(y) = 0 \ , \quad \text{dus} \quad \varphi(y) = C \ .$$

De algemene oplossing is dus

$$\frac{1}{3}x^3 + xy^2 + C = 0 \ .$$

<u>Voorbeeld</u>. Bepaal de algemene oplossing van

$$x + 2y + (2x + 1)y' = 0 \ .$$

Neem $P(x,y) = x + 2y$ en $Q(x,y) = 2x + 1$. De differentiaalvergelijking is exact. Uit $\frac{\partial F}{\partial x} = x + 2y$ volgt

$$F(x,y) = \tfrac{1}{2}x^2 + 2xy + \varphi(y)$$

Dan is $\frac{\partial F}{\partial y} = 2x + \varphi'(y)$, en hieruit volgt $\varphi'(y) = 1$. Dus $\varphi(y) = y + C$.
De algemene oplossing is dan

$$\tfrac{1}{2}x^2 + 2xy + y + C = 0 \ .$$

Het komt vaak voor dat een gegeven differentiaalvergelijking van het type

$$P(x,y) + Q(x,y)y' = 0$$

niet exact is, d.w.z. dat P en Q niet voldoen aan (5.6). In sommige gevallen lukt het om deze vergelijking exact te maken door middel van een zg. <u>integrerende factor</u>. Een integrerende factor is een functie $\mu(x,y) \not\equiv 0$, zodat

$$\mu P + \mu Q y' = 0 \tag{5.7}$$

een exacte differentiaalvergelijking is. Dat wil zeggen dat μ voldoet aan de vergelijking

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

ofwel

$$P\,\frac{\partial\mu}{\partial y} - Q\,\frac{\partial\mu}{\partial x} + \left(\frac{\partial P}{\partial y} - \frac{\partial Q}{\partial x}\right)\mu = 0 \,. \tag{5.8}$$

Het oplossen van deze (partiële) differentiaalvergelijking is in het algemeen moeilijk, zo niet onmogelijk. We behoeven echter van (5.8) niet de algemene oplossing te bepalen. Als we één functie μ kunnen vinden dan zijn we klaar. Daarom proberen we een speciale μ te vinden, bv. een μ die alleen afhangt van x, van y, van x + y of van xy.

<u>Voorbeeld.</u>

$$x^2 + y^2 + 2x + 2yy' = 0 \,.$$

De gegeven differentiaalvergelijking is niet exact, dus voeren we een integrerende factor μ in. (5.8) is in dit geval

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

We kiezen voor μ een functie die alleen van x afhangt, dan blijft van de vergelijking slechts over

$$\frac{\partial\mu}{\partial x} = \mu, \quad \text{met als oplossing} \quad \mu = e^x \,.$$

De gegeven vergelijking gaat over in de exacte differentiaalvergelijking

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

Dus

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

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

De algemene oplossing is dus

$$(x^2 + y^2)e^x = D , \quad D > 0 .$$

Opmerking. De gegeven differentiaalvergelijking kan ook als volgt worden opgelost.

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

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

$$x + \log(x^2 + y^2) = C \quad \text{of} \quad (x^2 + y^2)e^x = D , \quad D > 0 .$$

4. Lineaire differentiaalvergelijkingen van de eerste orde

Deze vergelijkingen hebben de gedaante

$$y' + P(x)y = Q(x) . \tag{5.9}$$

De algemene oplossing van (5.9) kan als volgt geschreven worden

$$y(x) = y_0(x) + \lambda y_1(x) . \tag{5.10}$$

Hierin is $y_0(x)$ een oplossing van (5.9), een zg. particuliere oplossing en is $y_1(x)$ een oplossing van de bij (5.9) behorende homogene differentiaalvergelijking

$$y' + P(x)y = 0 , \tag{5.11}$$

dus is $\lambda y_1(x)$, met λ een willekeurige constante, de algemene oplossing van (5.11). Zie voor dit alles Wiskunde II, hoofdstuk VI, § 1.

Het oplossen van (5.9) gaat nu als volgt.
Eerst lossen we de homogene vergelijking (5.11) op. Dit kan met de methode van par. 2. We vinden dan

$$y_1(x) = e^{-\int P(x)dx} .$$

Om vervolgens $y_0(x)$ te bepalen stellen we

$$y_0(x) = c(x) \cdot y_1(x)$$

met $c(x)$ een onbekende functie. Omdat $y_0(x)$ oplossing moet zijn van (5.9) moet $c(x)$ voldoen aan

$$c'(x)y_1(x) + c(x)\{y_1'(x) + P(x)y_1(x)\} = Q(x) \; ,$$

dus, omdat $y_1(x)$ oplossing is van de homogene vergelijking,

$$c'(x)y_1(x) = Q(x) \; ,$$

waaruit $c(x)$ door integratie direct volgt.

<u>Voorbeeld.</u>

$$y' + \frac{y}{x \log x} = \frac{1}{x} \; .$$

De homogene vergelijking

$$y' + \frac{y}{x \log x} = 0$$

heeft als oplossing $y_1(x) = \frac{1}{\log x}$. We stellen $y_0(x) = c(x)\,\frac{1}{\log n}$, dan volgt

$$c'(x) = \frac{\log x}{x} \Rightarrow c(x) = \tfrac{1}{2} \log^2 x \Rightarrow y_0(x) = \tfrac{1}{2} \log x \; .$$

De algemene oplossing is dus

$$y(x) = \tfrac{1}{2} \log x + \frac{\lambda}{\log x} \; .$$

<u>Voorbeeld.</u>

$$y' + \frac{2x}{1 - x^2}\, y = \frac{1}{1 + x^2} \; .$$

De oplossing van de homogene vergelijking is $y_1(x) = x^2 - 1$.
We stellen $y_0(x) = c(x)(x^2 - 1)$, dan volgt

$$c'(x) = \frac{1}{x^2 + 1}\,\frac{1}{x^2 - 1} = -\tfrac{1}{2}\,\frac{1}{x^2 + 1} + \tfrac{1}{4}\,\frac{1}{x - 1} - \tfrac{1}{4}\,\frac{1}{x + 1} \; ,$$

$$c(x) = -\tfrac{1}{2} \arctan x + \tfrac{1}{4} \log \left|\frac{x - 1}{x + 1}\right| .$$

De algemene oplossing is

$$y(x) = (x^2 - 1)(-\tfrac{1}{2}\arctan x + \tfrac{1}{4}\log\left|\frac{x-1}{x+1}\right| + \lambda) .$$

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

$$(x - x^2)y' + (1 - 2x)y = e^x .$$

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

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

Hieruit volgt dat de algemene oplossing is

$$(x - x^2)y = e^x + C .$$

5. Homogene differentiaalvergelijkingen

Dit zijn vergelijkingen van de gedaante

$$y' = f(\tfrac{y}{x}) . \tag{5.12}$$

Door substitutie van $z = \frac{y}{x}$ dus van $y = xz$ gaat deze vergelijking over in

$$xz' + z = f(z) .$$

Deze vergelijking is oplosbaar door scheiding van variabelen (zie par. 2).

We geven ter illustratie een voorbeeld.

$$(x^2 - y^2) + 2xyy' = 0 ,$$

$$y' = \frac{y^2 - x^2}{2xy} = \tfrac{1}{2}(\tfrac{y}{x}) - \tfrac{1}{2}(\tfrac{x}{y}) .$$

Substitutie van $y = xz$ levert

$$xz' + z = \tfrac{1}{2}z - \frac{1}{2z}$$

$$xz' = -\frac{z^2 + 1}{2z}$$

$$\int \frac{2z\,dz}{z^2 + 1} = -\int \frac{dx}{x}$$

$$\log(z^2 + 1) = -\log|x| + C_0 ,$$

waaruit volgt dat de algemene oplossing is

$$x^2 + y^2 = Cx$$

met C een willekeurige constante, $C \neq 0$.

Een differentiaalvergelijking die niet homogeen is, maar door een eenvoudige substitutie homogeen te maken is, is

$$y' = f\left(\frac{ax + by + c}{px + qy + r}\right)$$

waarin a, b, c, p, q, r constanten zijn, en er geldt $\frac{a}{p} \neq \frac{b}{q}$.
We substitueren

$$\begin{aligned} x &= X + \xi \\ y &= Y + \eta \end{aligned} \qquad (5.13)$$

waarbij ξ en η zodanig gekozen moeten (en kunnen) worden dat de vergelijking homogeen is in X en Y.

Voorbeeld.

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

Met de substitutie (5.13) gaat de vergelijking over in

$$\frac{dY}{dX} = \frac{X + \xi - Y - \eta - 4}{X + \xi + Y + \eta - 2} .$$

Dan moeten ξ en η voldoen aan de vergelijkingen

$$\begin{aligned} \xi - \eta &= 4 \\ \xi + \eta &= 2 \end{aligned} \implies \xi = 3 \text{ en } \eta = -1 .$$

De differentiaalvergelijking wordt dan

$$Y' = \frac{X - Y}{X + Y}$$

en dit is een homogene differentiaalvergelijking.

Opgave. Los deze laatste differentiaalvergelijking op.

Opmerking. Als $\frac{a}{p} = \frac{b}{q}$ dan substitueren we $z = ax + by$, waardoor een differentiaalvergelijking ontstaat die oplosbaar is. Ga dit na!

6. Machtreekssubstitutie

De tot nu toe behandelde oplossingsmethoden geven de oplossing van een differentiaalvergelijking in de vorm van een impliciete of expliciete formule, opgebouwd uit bekende functies. Het berekenen van de numerieke waarde van de oplossing in een bepaald punt kan dan nog wel een heel werk zijn.

Een andere manier om de oplossing voor te stellen is als machtreeks, zo deze bestaat. Om deze machtreeksontwikkeling van de oplossing te krijgen substitueren we een machtreeks met nog te bepalen coëfficiënten in de differentiaalvergelijking.

Voorbeeld.

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

Met scheiding van variabelen vinden we dat de algemene oplossing van deze differentiaalvergelijking is

$$y(x) = Ae^{\frac{1}{3}x^3} .$$

Stel $y(x)$ heeft een machtreeksontwikkeling

$$y(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n . \qquad (5.14)$$

Dan is

$$y'(x) = a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \dots = \sum_{n=1}^{\infty} na_n x^{n-1} .$$

Substitutie hiervan in de differentiaalvergelijking geeft

$$(a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \dots) - (a_0 x^2 + a_1 x^3 + a_2 x^4 + \dots) = 0 .$$

De coëfficiënten a_i moeten zodanig gekozen worden dat de coëfficiënt van x^n voor $n = 0,1,2,\dots$ gelijk aan nul is. Dus geldt

$$
\begin{array}{ll}
x^0 & a_1 = 0 \\
x^1 & a_2 = 0 \\
x^2 & 3a_3 - a_0 = 0 \\
x^3 & 4a_4 - a_1 = 0 \\
\vdots & \\
x^n & (n+1)a_{n+1} - a_{n-2} = 0 .
\end{array}
$$

Hieruit volgt

$$a_1 = a_4 = a_7 = \ldots = 0$$

$$a_2 = a_5 = a_8 = \ldots = 0 .$$

Alleen de a's waarvan de index een drievoud is zijn niet nul, als we $a_0 \neq 0$ stellen.

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

Als oplossing vinden we dus

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

In de meeste gevallen is de machtreeks natuurlijk niet uit te drukken in elementaire functies.

<u>Voorbeeld</u>.

$$y' = x + y^2 .$$

Substitutie van de machtreeks (5.14) levert

$$a_1 + 2a_2\ x + 3a_3\ x^2 + \ldots = x + (a_0 + a_1\ x + \ldots)(a_0 + a_1\ x + a_2\ x^2 + \ldots) .$$

Gelijkstelling van de coëfficiënten van gelijke machten van x geeft

$$
\begin{array}{ll}
x^0 & a_1 = a_0^2 \\
x^1 & 2a_2 = 1 + a_0\, a_1 + a_1\, a_0 \\
x^2 & 3a_3 = a_0\, a_2 + a_1^2 + a_2\, a_0 \\
x^3 & 4a_4 = a_0\, a_3 + a_1\, a_2 + a_2\, a_1 + a_3\, a_0 \\
\vdots & \\
x^n & (n+1)a_{n+1} = \sum_{k=0}^{n} a_k\, a_{n-k} \qquad n \geq 2 \,.
\end{array}
\tag{5.15}
$$

Voor een willekeurige waarde van $a_0 = y(0)$ kunnen achtereenvolgens $a_1, a_2, \ldots$ uit bovenstaande formules worden berekend. Bijvoorbeeld bij de beginvoorwaarde $y(0) = 1$ vinden we

$$a_0 = a_1 = 1 \;, \quad a_2 = \frac{3}{2} \,, \quad a_3 = \frac{4}{3} \,, \quad a_4 = \frac{17}{12} \,.$$

Als oplossing vinden we dus

$$y(x) = 1 + x + \frac{3}{2}\, x^2 + \frac{4}{3}\, x^3 + \frac{17}{12}\, x^4 + \ldots \,.$$

Dit is echter alleen dan een oplossing als de machtreeks in een omgeving van de oorsprong convergeert.

We zullen bewijzen dat geldt

$$0 < a_n \leq \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{1}{3}(n+1)} \,.$$

Bewijs met volledige inductie.

a) Voor a_0, a_1 en a_2 is de bewering juist.

b) Stel de bewering is juist voor a_0 t/m a_n, dan volgt uit (5.15)

$$0 < (n+1)a_{n+1} \leq \sum_{k=0}^{n} \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{k+1}{3}} \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{n-k+1}{3}} = (n+1)\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{n+2}{3}} \,.$$

Dus voor de algemene term van de machtreeks van $y(x)$ geldt

$$|a_n\, x^n| \leq \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{n+1}{3}} |x|^n \,.$$

Met het convergentiecriterium van Cauchy volgt dan dat de reeks voor $y(x)$ zeker convergeert voor

$$|x| < \sqrt[3]{\tfrac{2}{3}} .$$

Dat de methode van de machtreekssubstitutie niet altijd toegepast kan worden zien we aan de hand van het volgende voorbeeld.

Voorbeeld.

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

Substitutie van (5.14) levert

$$\sum_{n=1}^{\infty} na_n x^{n+1} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = 0 ,$$

waaruit volgt

$$a_0 = 0 , \quad a_1 = 0 , \quad a_{n+1} = na_n \quad \text{voor } n \geq 1 ,$$

dus $a_n = 0$ voor alle n. Dit geeft als oplossing $y(x) \equiv 0$, een oninteressante oplossing.

Met scheiding van variabelen vinden we als algemene oplossing

$$y(x) = Ae^{-1/x}$$

en deze oplossing is in de omgeving van $x = 0$ niet in een machtreeks te ontwikkelen. Men herkent de differentiaalvergelijkingen waar dit optreedt aan het feit dat de coëfficiënt van de hoogste afgeleide (hier y') een functie is van x die een nulpunt heeft in $x = 0$.

Het is mogelijk de methode van machtreekssubstitutie uit te breiden zodat ook differentiaalvergelijkingen van dit type ermee op te lossen zijn. We gaan daar niet verder op in.

7. Lineaire stelsels differentiaalvergelijkingen

We behandelen het geval van de homogene lineaire stelsels met constante coefficiënten.

Voorbeeld.

$$\frac{dy_1}{dx} = 4y_1 + 2y_2$$
$$\frac{dy_2}{dx} = -3y_1 - y_2 \ . \qquad (5.16)$$

Analoog aan Wiskunde II, hoofdstuk VI, § 2 substitueren we

$$y_1(x) = a_1 e^{\lambda x}, \quad y_2(x) = a_2 e^{\lambda x} \qquad \text{ofwel} \qquad \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = e^{\lambda x}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} .$$

Dit geeft

$$\lambda a_1 e^{\lambda x} = 4a_1 e^{\lambda x} + 2a_2 e^{\lambda x}$$
$$\lambda a_2 e^{\lambda x} = -3a_1 e^{\lambda x} - a_2 e^{\lambda x}$$

ofwel

$$(4-\lambda)a_1 + 2a_2 = 0$$
$$-3a_1 + (-1-\lambda)a_2 = 0 \ .$$

Dit stelsel vergelijkingen heeft een van nul verschillende oplossing als

$$\begin{vmatrix} 4-\lambda & 2 \\ -3 & -1-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \text{dus als } \lambda = 1 \text{ of } \lambda = 2 \ .$$

Als $\lambda = 1$ dan is $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix}$, als $\lambda = 2$ dan is $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

De algemene oplossing van (5.16) is dan

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \alpha e^{x}\begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix} + \beta e^{2x}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} .$$

We kunnen deze methode ook in vectornotatie formuleren. We doen dit voor het algemene geval.

Zij gevraagd het stelsel van n lineaire differentiaalvergelijkingen voor de n onbekende functies $y_1, y_2, \ldots, y_n$ op te lossen

$$
\begin{aligned}
\frac{dy_1}{dx} &= a_{11}\, y_1 + a_{12}\, y_2 + \ldots + a_{1n}\, y_n \\
&\vdots \\
\frac{dy_n}{dx} &= a_{n1}\, y_1 + a_{n2}\, y_2 + \ldots + a_{nn}\, y_n \,.
\end{aligned}
\tag{5.17}
$$

Zij

$$
A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad \underline{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} .
$$

Dan gaat (5.17) over in

$$
\frac{d\underline{y}}{dx} = A\underline{y} \,.
$$

We substitueren (vergelijk Wiskunde II, hoofdstuk VI, § 2)

$$
\underline{y} = e^{\lambda x} \cdot \underline{u} \quad \text{met } \underline{u} \neq \underline{0} \,.
$$

Dan krijgen we het <u>eigenwaardeprobleem</u>

$$
\lambda \underline{u} = A\underline{u} \,.
$$

We zoeken dus de eigenwaarden λ en de bijbehorende eigenvectoren $\underline{u}$ van de matrix A. Heeft de matrix n verschillende eigenwaarden dan vinden we zo n onafhankelijke oplossingen en daarmee de algemene oplossing. Heeft A meervoudige eigenwaarden, dan kan men ad hoc toch n onafhankelijke oplossingen vinden. We gaan op dit laatste verder niet in.

<u>Opgave</u>. Bewijs de veronderstelling die hierboven stilzwijgend gemaakt is, namelijk dat de oplossingen van het stelsel (5.17) een vectorruimte vormen. (Deze vectorruimte heeft de dimensie n maar dat hoeft U niet te bewijzen.)

8. Differentievergelijkingen

Een differentievergelijking van de orde n is een vergelijking van de vorm

$$F(y_{k+n}, y_{k+n-1}, \ldots, y_{k+1}, y_k, k) = 0 \;, \qquad k \geq k_0 \;. \tag{5.18}$$

Een oplossing van deze differentievergelijking is een rij $y_{k_0}, y_{k_0+1}, y_{k_0+2}, \ldots$ waarvan voor elke $k \geq k_0$ de moot van $n+1$ getallen y_k t/m y_{k+n} voldoet aan de differentievergelijking.

Voorbeelden

$$y_{k+1}^2 - (y_k + 1)^2 = 0 \;.$$

Voor elke willekeurige p is $y_k = k + p$, $-\infty < k < \infty$, een oplossing.

$$y_{n+1} - (n+1)y_n + n^2 - 1 = 0 \;, \qquad n \geq 0 \;.$$

Voor elke willekeurige λ is $y_n = n + \lambda \cdot n!$, $n \geq 0$, een oplossing.

We behandelen in het vervolg alleen het geval dat de differentievergelijking lineair is, d.w.z. dat (5.18) er als volgt uitziet:

$$y_{k+n} + c_{n-1}\, y_{k+n-1} + \ldots + c_1\, y_{k+1} + c_0\, y_k = f(k) \;. \tag{5.19}$$

X De coëfficiënten c_j zullen in het algemeen van ~~n~~ j en van k afhangen. De bijbehorende homogene vergelijking is

$$y_{k+n} + c_{n-1}\, y_{k+n-1} + \ldots + c_1\, y_{k+1} + c_0\, y_k = 0 \;. \tag{5.20}$$

De oplossingen van de homogene vergelijking (5.20) vormen een n-dimensionale vectorruimte (vergelijk Wiskunde II, hoofdstuk VI, § 1). Dit kunnen we als volgt bewijzen.
Eerst bewijzen we dat de oplossingen van (5.20) een vectorruimte vormen.

Opgave. Bewijs dit door te laten zien dat

1) als de rij $\{y_m\}$ en de rij $\{z_m\}$ oplossingen zijn, ook de rij $\{y_m + z_m\}$ een oplossing is,
2) als de rij $\{y_m\}$ een oplossing is, ook de rij $\{\alpha y_m\}$ een oplossing is.

Dat de dimensie van de oplossingsruimte n is volgt uit

1) bij elk gegeven n-tal getallen $y_{k_0}, y_{k_0+1}, \ldots, y_{k_0+n-1}$ is de oplossing éénduidig bepaald;

2) $(y_{k_0}, y_{k_0+1}, \ldots, y_{k_0+n-1})$ als vector opgevat vormen een n-dimensionale vectorruimte.

Als basis voor de oplossingsruimte kunnen we bijvoorbeeld kiezen de oplossingen $\{y_m^{(i)}\}$ voor $i = 1,2,\ldots,n$, waarbij $\{y_m^{(i)}\}$ de oplossing is die behoort bij de <u>beginvoorwaarden</u>

$$y_{k_0+j} = 0 \quad \text{als} \quad j \neq i-1, \; y_{k_0+i-1} = 1 \;.$$

De oplossingen van de inhomogene vergelijking (5.19) vormen een zogenaamde <u>verschoven vectorruimte</u>.

Zij namelijk de rij $\{y_m^{(0)}\}$ een oplossing van (5.19) dan is de algemene oplossing van (5.19) te schrijven in de vorm

$$y_m = y_m^{(0)} + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \, y_m^{(i)} \;. \tag{5.21}$$

<u>Opgave</u>. Bewijs dit door na te gaan dat als $\{y_m\}$ en $\{z_m\}$ oplossingen zijn van (5.19), de rij $\{y_m - z_m\}$ een oplossing is van (5.20).

In het geval dat de coëfficiënten c_j constant zijn, d.w.z. onafhankelijk van k zijn, kunnen we de homogene vergelijking (5.20) oplossen met een methode die analoog is aan de methode waarmee in Wiskunde II, hoofdstuk II, de lineaire differentiaalvergelijking met constante coëfficiënten is opgelost.

We stellen daartoe

$$y_m = \lambda^m$$

en vullen dit in (5.20) in. Dit geeft

$$\lambda^{k+n} + c_{n-1}\,\lambda^{k+n-1} + \ldots + c_1\,\lambda^{k+1} + c_0\,\lambda^k = 0 \;,$$

ofwel, omdat $\lambda^k \neq 0$,

$$\lambda^n + c_{n-1}\,\lambda^{n-1} + \ldots + c_1\,\lambda + c_0 = 0 \;, \tag{5.22}$$

de zogenaamde <u>karakteristieke vergelijking</u>.

Veronderstel dat deze vergelijking n verschillende wortels $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ heeft, dan hebben we n onafhankelijke oplossingen $y_m^{(i)} = \lambda_i^m$ gevonden en dan is de algemene oplossing van (5.20)

$$y_m = \alpha_1 \lambda_1^m + \ldots + \alpha_n \lambda_n^m .$$

Opgave. Als λ een p-voudige wortel is van (5.22) dan hoort daarbij een p-dimensionale deelruimte van de oplossingsruimte. Bepaal een basis voor deze deelruimte (zie Wiskunde II, hoofdstuk VI, § 2).

Het vinden van een oplossing van de inhomogene vergelijking (5.19) lukt alleen bij eenvoudige f(k). We gaan hier niet verder op in.

Voorbeelden.

1. $$y_{k+2} - 5y_{k+1} + 6y_k = 0 .$$

De karakteristieke vergelijking is $\lambda^2 - 5\lambda + 6 = 0$. De oplossingen daarvan zijn $\lambda_1 = 2$, $\lambda_2 = 3$. De algemene oplossing van de differentievergelijking is dus

$$y_m = \alpha\, 2^m + \beta\, 3^m .$$

2. $$y_{k+2} + y_{k+1} - 2y_k = 0 .$$

De karakteristieke vergelijking is $\lambda^2 + \lambda - 2 = 0$. De oplossingen hiervan zijn $\lambda_1 = -2$, $\lambda_2 = 1$. De algemene oplossing van de differentievergelijking is dus

$$y_m = \alpha(-2)^m + \beta .$$

3. $$y_{k+2} - 2ay_{k+1} + y_k = 0 .$$

De karakteristieke vergelijking is $\lambda^2 - 2a\lambda + 1 = 0$. We onderscheiden de volgende gevallen.

1) $|a| > 1$. Stel $a > 1$. Dan is $\lambda_1 = a + \sqrt{a^2 - 1}$, $\lambda_2 = \lambda_1^{-1}$.
Zij $a = \cosh\varphi$ met $\varphi > 0$ dan is $\lambda_1 = e^{\varphi}$. De algemene oplossing van de differentievergelijking is dan

$$y_m = \alpha e^{\varphi m} + \beta e^{-\varphi m} .$$

Opgave. Ga na wat y_m is als $a < -1$.

2) $|a| < 1$. Dan is $\lambda_1 = a + i\sqrt{1 - a^2}$, $\lambda_2 = \lambda_1^{-1}$.
Zij $a = \cos\varphi$ met $0 < \varphi < \pi$, dan is $\lambda_1 = e^{i\varphi}$. De algemene oplossing van de differentievergelijking is dan

$$y_m = \alpha e^{i\varphi m} + \beta e^{-i\varphi m} \quad \text{ofwel} \quad y_m = \alpha_1 \cos m\varphi + \beta_1 \sin m\varphi \; .$$

3) $a = 1$. Dan is $\lambda = 1$ een tweevoudige wortel. De algemene oplossing van de differentievergelijking is in dit geval

$$y_m = \alpha + \beta m \; .$$

4) $a = -1$. Dan is $\lambda = -1$ een tweevoudige wortel. De algemene oplossing van de differentievergelijking is in dit geval

$$y_m = \alpha(-1)^m + \beta m(-1)^m \; .$$

Opgave. Ga dit laatste zelf na.

Opgave. Bepaal de algemene oplossing van de op pag. 16 gegeven voorbeelden.

Hoofdstuk V Differentiaalvergelijkingen.

Los de volgende differentiaalvergelijkingen op.

1. $(1-x)y + (1+y)xy' = 0.$

2. $y + (x - \sin y)y' = 0.$

3. $(x^2+1)y' = (y+2)(x + \sqrt{x^2+1}).$

4. $y' + \dfrac{x}{(1+x^2)}\, y = \dfrac{1}{x(1+x^2)}.$

5. $2x^3y^2 - y + (2x^2y^3 - x)y' = 0.$
   (Hint: zoek een integrerende factor $\mu(xy)$).

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

7. $x(y-x)y' = y^2.$

8. $y^2(xyy' - 1) = 1 - x^2(1+y^2).$

9. $(2x - 4y + 5)y' = 2y - x - 3.$

10. $xy' + 2y - \sin x = 0.$

11. $y' = -\dfrac{2x + \sin y}{x \cos y}.$

12. $y'' - xy = 0.$

13. $y'' + xy' + y = 0.$

14. $y'' - e^x y = 0$ met $y(0) = 0$, $y'(0) = 1$.

15. Los op het stelsel $\dfrac{d\underline{y}}{dx} = A\underline{y}$ met

   a) $A = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$, b) $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 9 & 5 & 3 \\ -6 & -2 & 0 \end{pmatrix}$, c) $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$

Los de volgende differentievergelijkingen op.

16. $y_{n+2} + 5\,y_{n+1} + 6\,y_n = 0.$

17. $y_{n+2} - 3\,y_{n+1} + 2\,y_n = 0.$

18. $y_{n+3} - 3\,y_{n+2} + y_{n+1} - 3\,y_n = 0.$

Hoofdstuk VI. Numerieke integratie van gewone differentiaalvergelijkingen

1. Inleiding

In dit hoofdstuk behandelen we eerst het beginwaarde probleem bestaande uit een eerste orde differentiaalvergelijking

$$y' = f(x,y) \qquad x \geq x_0$$

en een beginvoorwaarde

$$y = y_0 \qquad x = x_0 \,.$$

Zoals in hoofdstuk V, pag. 2, al is opgemerkt is er (als f aan bepaalde eisen voldoet, bijv. als f en $\frac{\partial f}{\partial y}$ continu zijn) bij elke x_0 en y_0 precies één functie $y = y(x)$ die voldoet aan

$$y'(x) = f(x,y(x)) \qquad x > x_0$$

$$y(x_0) = y_0 \,.$$

Voor het numeriek oplossen van dit probleem bestaan vele methoden. Enkele daarvan zullen in dit hoofdstuk besproken worden.

Daarna behandelen we het beginwaarde probleem bestaande uit een hogere orde differentiaalvergelijking of een stelsel van eerste orde differentiaalvergelijkingen en een aantal beginvoorwaarden. In het bijzonder bespreken we het tweede orde beginwaarde probleem

$$y'' = f(x,y,y') \qquad x > x_0$$

$$\left.\begin{array}{l} y = y_0 \\ y' = \eta \,. \end{array}\right. \qquad x = x_0$$

Tenslotte behandelen we het randwaarde probleem bestaande uit een tweede orde differentiaalvergelijking

$$y'' = f(x,y,y') \qquad a < x < b$$

en twee randvoorwaarden, bijvoorbeeld

$$y = \alpha \qquad x = a$$

$$y = \beta \qquad x = b \,.$$

Om een numerieke benadering voor de oplossing $y = y(x)$ te krijgen vervangen we de differentiaalvergelijking door een differentievergelijking, bijv. door de afgeleiden door geschikte differenties te vervangen. De oplossing van deze differentievergelijking zullen we, ter onderscheiding van de exacte oplossing van het probleem, aanduiden met z. Zo krijgen we benaderingen $z_1, z_2, z_3, \ldots$ voor de waarden $y_n := y(x_n)$ van de oplossing in een aantal discrete punten x_n, $n = 1,2,3,\ldots$. Veelal zullen deze punten equidistant zijn, dus $x_n = x_0 + nh$. Natuurlijk nemen we $z_0 = y_0$.

2. De Taylorreeks methode

Zij gegeven het beginwaarde probleem

$$y' = f(x,y) \qquad x \geqslant x_0 \tag{6.1}$$

X

$$y(x_0) = y_0 \ . \tag{6.2}$$

Veronderstel dat de oplossing $y = y(x)$ in de buurt van $x = x_0$ een Taylorreeksontwikkeling heeft

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \ldots + \frac{h^m}{m!} y^{(m)}(x_0) + \mathcal{O}(h^{m+1}) \ . \tag{6.3}$$

Dan kunnen we als benadering z_1 voor $y(x_0 + h)$ een aantal termen van de Taylorreeks nemen. Bijvoorbeeld

$$z_1 = y_0 + hy_0' + \ldots + \frac{h^m}{m!} y_0^{(m)} \ . \tag{6.4}$$

We kunnen de afgeleiden $y_0^{(k)}$ berekenen door herhaald differentiëren van de differentiaalvergelijking (6.1). Zo krijgen we

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

$$y_0'' = f_x(x_0,y_0) + f_y(x_0,y_0)\cdot y_0'$$

$$\vdots$$

Een andere manier om de coëfficiënten van de Taylorreeks te bepalen is door middel van machtreekssubstitutie (hoofdstuk V, § 6).

De nauwkeurigheid van z_1 als benadering voor $y(x_1)$ hangt af van m en h. Vervolgens willen we een benadering voor $y(x_1 + h)$ op dezelfde manier bepalen. De Taylorreeks voor $y(x)$ in de buurt van x_1 is

$$y(x_1 + h) = y(x_1) + hy'(x_1) + \ldots + \frac{h^m}{m!} y^{(m)}(x_1) + \mathcal{O}(h^{m+1}) .$$

Echter de waarde van $y(x_1)$ is niet bekend. Het ligt voor de hand voor $y(x_1)$ te nemen z_1, voor $y'(x_1)$ te nemen $f(x_1,z_1)$, voor $y''(x_1)$ te nemen $f_x(x_1,z_1) + f_y(x_1,z_1)\cdot f(x_1,z_1)$, etc.

Dit komt erop neer dat we in de buurt van $x = x_1$ niet de Taylorreeks van de oplossing $y(x)$ van het oorspronkelijke probleem (6.1) en (6.2) gebruiken, maar dat we van het "nabij gelegen" probleem

$$y' = f(x,y) \qquad x \geq x_1$$

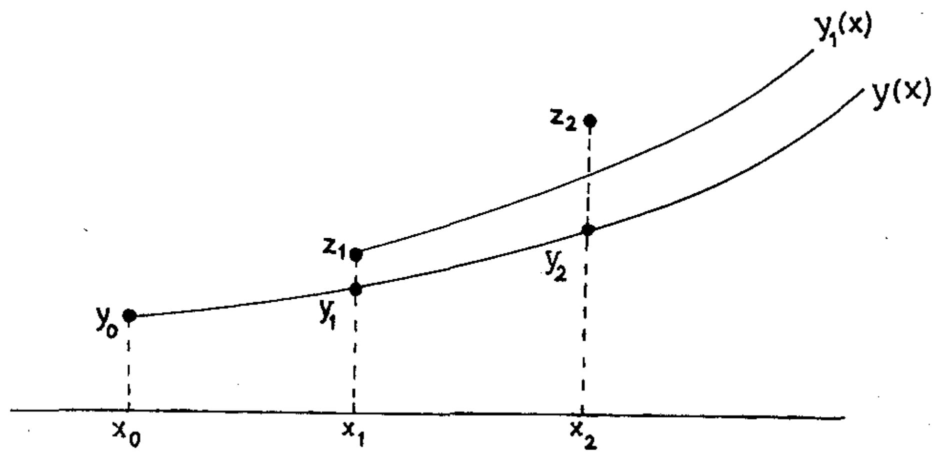
$$y(x_1) = z_1$$

de Taylorreeks van de oplossing $y_1(x)$ opschrijven

$$y_1(x_1 + h) = y_1(x_1) + hy_1'(x_1) + \ldots + \frac{h^m}{m!} y_1^{(m)}(x_1) + \mathcal{O}(h^{m+1}) \tag{6.5}$$

en vervolgens als benadering z_2 voor $y(x_2)$ nemen:

$$z_2 := z_1 + hf(x_1,z_1) + \ldots + \frac{h^m}{m!} y_1^{(m)}(x_1) . \tag{6.6}$$



Dit proces kunnen we herhalen. We krijgen zo een rij benaderingen $z_1, z_2, z_3, \ldots$. De stapgrootte h kan bij iedere volgende stap opnieuw gekozen worden.

Bij de beschouwing van de afbreekfout van deze methode (en van alle andere methoden voor het oplossen van differentiaalvergelijkingen) maken we onderscheid tussen de locale afbreekfout en de globale afbreekfout.
De locale afbreekfout is de fout die in één integratiestap gemaakt wordt. Dus stel dat $y_{n-1}(x)$ de oplossing is van

$$y' = f(x,y) \qquad x \geq x_{n-1}$$

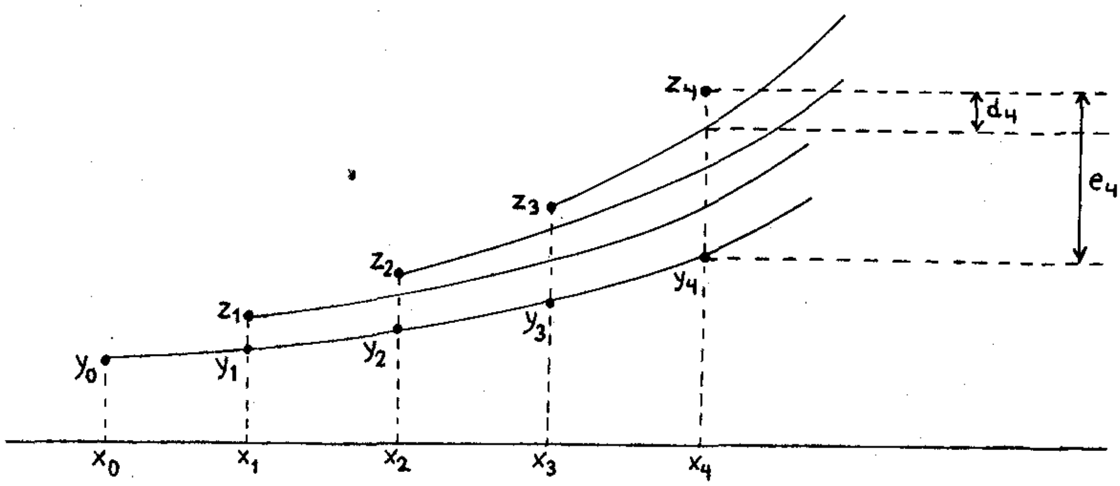
$$y(x_{n-1}) = z_{n-1} \ .$$

Dan is de locale afbreekfout gedefinieerd door

$$d_n := y_{n-1}(x_n) - z_n \ . \tag{6.7}$$

In bovenstaand geval is d_1 de term $\mathcal{O}(h^{m+1})$ uit (6.3) en d_2 de term $\mathcal{O}(h^{m+1})$ uit (6.5).
De globale afbreekfout is de totale fout in de oplossing. Dus de globale afbreekfout in een punt $x = x_n$ is gedefinieerd door

$$e(x_n) := y(x_n) - z_n \ .$$



Uit praktisch oogpunt is de Taylorreeks methode niet aan te bevelen voor hogere waarden van m. De berekening van de coëfficiënten van de reeks moet in elk punt opnieuw gebeuren en kan zeer bewerkelijk zijn.
De methode is echter zeer geschikt om startwaarden te berekenen voor andere integratiemethoden. We komen daarop terug in de volgende paragrafen.

3. De methode van Euler

De methode van Euler krijgen we als we van de Taylorreeks (6.3) alleen de eerste twee termen meenemen. Dit betekent dat de benaderingen z berekend worden met de formule van Euler:

$$z_{n+1} = z_n + hf(x_n, z_n) \qquad n = 0,1,2,\ldots \tag{6.8}$$

met als startwaarde

$$z_0 = y_0 \,.$$

Opgave. Geef een meetkundige interpretatie van (6.8). Teken een plaatje.

We zullen (6.8) nog op twee andere manieren afleiden.

a) We vervangen in (6.1) de afgeleide door een voorwaartse differentie

$$y'(x_n) = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_n)}{h} + R$$

met $R = \frac{1}{2}hy''(\xi_n)$. Dit geeft

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + hR \,. \tag{6.9}$$

We laten R weg en vervangen y_n door z_n.

b) De differentiaalvergelijking (6.1) laat zich ook schrijven in de vorm

$$y(x) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x} f(t, y(t))dt \,. \tag{6.10}$$

Speciaal voor het interval (x_n, x_{n+1}) volgt hieruit

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t))dt \,.$$

Substitueren we hierin de integratieformule

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} \varphi(t)dt = h\varphi(x_n) + hR ,$$

dan krijgen we bovenstaande formule (6.9).

De locale afbreekfout bij de methode van Euler is $\mathcal{O}(h^2)$, want

$$d_n = \tfrac{1}{2}h^2y''(\xi_n) .$$

De waarde van de globale afbreekfout zullen we in een speciaal geval uitrekenen.

<u>Voorbeeld</u>. Beschouw het volgende beginwaarde probleem

$$y' = y \qquad x \geq 0$$

$y(0) = \cancel{1}$, 2 is beter.

waarvan de exacte oplossing $y(x) = e^x$ is.
De formule van Euler (6.8) wordt in dit geval (equidistante punten)

$$z_{n+1} = (1 + h)z_n , \qquad n = 0,1,2,\ldots .$$

De oplossing van deze differentievergelijking, met als beginvoorwaarde $z_0 = 1$, luidt

$$z_n = (1 + h)^n , \qquad n = 0,1,2,\ldots .$$

Voor een vast punt $x = x_n = nh$ geldt

$$z_n = (1 + h)^{\frac{x}{h}} = e^{\frac{x}{h}\log(1+h)} =$$

$$= e^x \cdot e^{-\frac{xh}{2} + \mathcal{O}(h^2)} = e^x(1 - \frac{x}{2}h + \mathcal{O}(h^2)) .$$

De globale afbreekfout is dan

$$e(x) = e^x - z_n = + \frac{xe^x}{2}h + \mathcal{O}(h^2) .$$

Dus de globale afbreekfout is $\mathcal{O}(h)$, terwijl de locale afbreekfout $\mathcal{O}(h^2)$ is.

In het algemeen geldt dat de globale afbreekfout $\mathcal{O}(h^m)$ is als de locale afbreekfout $\mathcal{O}(h^{m+1})$ is. (We geven hiervan geen bewijs.)

Opmerking. Hetzelfde verschijnsel doet zich voor bij numerieke integratiemethoden (zie hoofdstuk III).

Een nauwkeurigere methode dan de methode van Euler krijgen we door de afgeleide in (6.1) te vervangen door een centrale differentie

$$y'(x_n) = \frac{y(x_{n+1}) - y(x_{n-1})}{2h} + R$$

met $R = -\frac{1}{6}h^2y'''(\xi_n)$. Dit geeft de formule

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n,y_n) + 2hR\ .$$

De bijbehorende integratieformule is

$$z_{n+1} = z_{n-1} + 2hf(x_n,z_n)\ . \tag{6.11}$$

Dit is de zogenaamde gemodificeerde formule van Euler. De locale afbreekfout is in dit geval $d_n = \mathcal{O}(h^3)$.

Opgave. Bereken voor het beginwaarde probleem

$$y' = y \qquad x \geq 0$$

$$y(0) = 1$$

de globale afbreekfout bij de gemodificeerde methode van Euler.

Opgave. Ga na dat (6.11) kan worden afgeleid op de manier van pag. 5 onder b), uitgaande van (6.10).

De methode van Euler is een zogenaamde eenstaps methode: we hebben alleen de waarde van z_n nodig om de waarde van z_{n+1} te berekenen. De gemodificeerde methode van Euler is een zogenaamde tweestaps methode: voor het berekenen van z_{n+1} hebben we de waarden van z_n en z_{n-1} nodig. Voor het gebruik van deze methode hebben we een aparte startprocedure nodig, omdat we behalve de gegeven waarde $z_0 = y_0$ ook de waarde van z_1 moeten kennen. De waarde van z_1 kan bijvoorbeeld met de Taylorreeks methode bepaald worden.

<u>Voorbeeld</u>.

$$y' = -2xy^2 \qquad x > 0$$

$$y(0) = 1 \; .$$

De exacte oplossing hiervan is $y = \dfrac{1}{1 + x^2}$.

Met de methode van Euler krijgen we bij $h = 0.2$ en $h = 0.1$:

x_n	$z_n(0.2)$	$z_n(0.1)$	$y_n = \dfrac{1}{1 + x_n^2}$
0.0	1	1	1
0.1		1	0.990 099
0.2	1	0.98	0.961 538
0.3		0.941 584	0.917 431
0.4	0.92	0.888 389	0.862 069
0.5		0.825 250	0.800 000
0.6	0.784 576	0.757 146	0.735 294
0.7		0.688 354	0.671 140
0.8	0.636 842	0.622 018	0.609 756
0.9		0.560 113	0.552 486
1.0	0.507 060	0.503 642	0.500 000

De globale afbreekfout is bij $y(1)$

$$h = 0.2 \qquad e_2 = 0.007\,060$$

$$h = 0.1 \qquad e_1 = 0.003\,642 \; .$$

Er geldt bij benadering $e_2 = 2 \times e_1$ in overeenstemming met het feit dat $e = \mathcal{O}(h)$.

Bij de gemodificeerde methode van Euler berekenen we eerst z_1 met de Taylor-reeks $y(h) = 1 - h^2 + \mathcal{O}(h^4)$. Vervolgens krijgen we bij $h = 0.2$ en $h = 0.1$:

x_n	$z_n(0.2)$	$z_n(0.1)$	y_n
0.0	1	1	1
0.1		0.99	0.990 099
0.2	0.96	0.960 796	0.961 538
0.3		0.916 150	0.917 431
0.4	0.852 544	0.860 076	0.862 069
0.5		0.797 793	0.800 000
0.6	0.727 414	0.732 781	0.735 294
0.7		0.668 921	0.671 140
0.8	0.598 561	0.607 493	0.609 756
0.9		0.550 826	0.552 486
1.0	0.498 118	0.498 265	0.500 000

De globale afbreekfout is bij y(1)

$$h = 0.2 \qquad e_2 = 0.001\ 882$$

$$h = 0.1 \qquad e_1 = 0.001\ 735 \ .$$

Hier geldt niet bij benadering $e_2 = 4 \times e_1$ wat we op grond van het feit dat $e = \mathcal{O}(h^2)$ wel verwachtten.
Berekenen we echter de benadering voor y(1) met $h = 0.05$ dan vinden we $z_{20} = 0.499\ 606$, en dus

$$h = 0.05 \qquad e_0 = 0.000\ 393$$

en nu geldt wel bij benadering $e_1 = 4 \times e_0$. Kennelijk is in het eerste geval de waarde van h zo groot dat $e \approx ch^2$ nog niet geldt.

4. Predictor-corrector methoden

De tot nu toe behandelde methoden zijn expliciete methoden, dat wil zeggen dat z_{n+1} expliciet uit voorgaande waarden van z te bepalen is.
De meest eenvoudige impliciete methode is de methode gebaseerd op de trapeziumregel.

$$z_{n+1} = z_n + \frac{h}{2} \left(f(x_n,z_n) + f(x_{n+1},z_{n+1})\right) \ . \tag{6.12}$$

Deze formule volgt uit (6.10) door de integraal te benaderen met de trapeziumregel. Dit geeft

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\,(f(x_n,y_n) + f(x_{n+1},y_{n+1})) - \frac{1}{12}\,h^3 y'''(\xi_n)\ .$$

De locale afbreekfout van de trapeziumregel is dus $\mathcal{O}(h^3)$.
De methode heet implicie<u>t</u> omdat z_{n+1} uit (6.12) niet expliciet te bepalen is. Formule (6.12) is een vergelijking waaruit z_{n+1} moet worden opgelost. Het bepalen van z_{n+1} uit (6.12) gebeurt iteratief op de volgende wijze. Veronderstel dat we een beginschatting $z_{n+1}^{(0)}$ hebben, dan berekenen we achtereenvolgens

$$z_{n+1}^{(k+1)} = z_n + \tfrac{1}{2}h(f(x_n,z_n) + f(x_{n+1},z_{n+1}^{(k)}))$$

voor $k = 0,1,2,\ldots$, totdat $|z_{n+1}^{(k+1)} - z_{n+1}^{(k)}|$ voldoende klein is. De snelheid waarmee dit iteratieproces convergeert hangt af van $z_{n+1}^{(0)}$ en van h. niet het juiste woord

Een goede beginschatting $z_{n+1}^{(0)}$ bepalen we met behulp van een expliciete methode. Bijvoorbeeld met de gemodificeerde formule van Euler (6.11).
Men noemt de expliciete formule (6.11) de predictor formule en de impliciete formule (6.12) de corrector formule van de impliciete methode.

Voorbeeld

$$y' = -2xy^2 \qquad x > 0$$

$$y(0) = 1\ .$$

De gebruikte formules zijn:

$$z_{n+1} = z_{n-1} - 4hx_n z_n^2 \qquad \text{(predictor)}$$

$$z_{n+1} = z_n - h(x_n z_n^2 + x_{n+1} z_{n+1}^2) \qquad \text{(corrector).}$$

Voor het berekenen van z_1 kunnen we de predictor niet gebruiken. We nemen in dit geval als predictor de formule van Euler (6.8):

$$z_1 = z_0 - 2hx_0 z_0^2 = z_0\ .$$

Met $h = 0.2$ en $h = 0.1$ krijgen we dan

	h = 0.2		h = 0.1		
x_n	z_n (pr)	z_n	z_n (pr)	z_n	y_n
0		1		1	
0.1			1	0.990 195	0.990 099
0.2	1	0.962 912	0.960 780	0.961 886	0.961 538
0.3			0.916 177	0.918 095	0.917 431
0.4	0.851 648	0.865 849	0.860 738	0.863 016	0.862 069
0.5			0.798 927	0.801 133	0.800 000
0.6	0.723 010	0.740 137	0.734 653	0.736 497	0.735 294
0.7			0.670 950	0.672 311	0.671 140
0.8	0.602 903	0.614 068	0.609 937	0.610 822	0.609 756
0.9			0.552 918	0.553 410	0.552 486
1.0	0.498 806	0.503 111	0.500 567	0.500 769	0.500 000

De locale afbreekfout bij de trapeziumregel is $\mathcal{O}(h^3)$.
We berekenen ook hier de globale afbreekfout voor het speciale beginwaarde probleem:

$$y' = y \ , \quad y(0) = 1 \ .$$

De trapeziumregel (6.12) wordt in dit geval

$$z_{n+1} = z_n + \frac{h}{2}(z_n + z_{n+1})$$

waaruit volgt

$$z_{n+1} = \left(\frac{1 + \frac{h}{2}}{1 - \frac{h}{2}}\right) z_n \ , \qquad n = 0,1,2,\ldots \ .$$

De oplossing van deze differentievergelijking, met als beginwaarde $z_0 = 1$, luidt

$$z_n = \left(\frac{1 + \frac{h}{2}}{1 - \frac{h}{2}}\right)^n \ , \qquad n = 0,1,2,\ldots \ .$$

Op dezelfde manier als bij de formule van Euler vinden we voor een vast punt $x = x_n = nh$

$$z_n = e^x\left(1 + \frac{xh^2}{12} + \mathcal{O}(h^4)\right) \ .$$

De globale afbreekfout is dus $\mathcal{O}(h^2)$.

Een ander voorbeeld van een impliciete methode is de zogenaamde methode van Milne. Deze krijgen we door in (6.10) de integraal te benaderen met de formule van Simpson. Dit geeft

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}(y'_{n-1} + 4y'_n + y'_{n+1}) - \frac{h^5}{90} y^{(5)}(\xi_n) .$$

De corrector formule wordt dan

$$z_{n+1} = z_{n-1} + \frac{h}{3}(f(x_{n-1},z_{n-1}) + 4f(x_n,z_n) + f(x_{n+1},z_{n+1})) . \quad (6.13)$$

Van de predictor formule eisen we dat de afbreekfout van dezelfde orde is als de afbreekfout van de corrector formule, dus $\mathcal{O}(h^5)$. Daarom nemen we in dit geval als predictor de volgende formule

$$z_{n+1} = z_{n-3} + \frac{4h}{3}(2f(x_{n-2},z_{n-2}) - f(x_{n-1},z_{n-1}) + 2f(x_n,z_n)) . \quad (6.14)$$

Deze formule is gebaseerd op een open Newton-Cotes formule (zie hoofdstuk III, pag. 5, formules (3.6)).

De start van deze methode vereist twee waarden om (6.13) te kunnen gebruiken en vier waarden om (6.14) te kunnen gebruiken. Deze waarden kunnen bijvoorbeeld met de Taylorreeks methode worden bepaald.

Opmerking. De methode van Milne is als handrekenmethode altijd erg populair geweest. Met de komst van de rekenautomaat is de belangstelling voor deze methode vrijwel verdwenen.

We noemen tenslotte nog een klasse van predictor-corrector methoden.
De predictor formule heeft de vorm

$$z_{n+1} = z_n + h \sum_{j=0}^{k} c_j f(x_{n-j},z_{n-j}) .$$

De coëfficiënten zijn zodanig dat de orde van de afbreekfout zo groot mogelijk is. De orde van de globale afbreekfout blijkt dan k+1 te zijn.
Voorbeelden zijn (we schrijven f_{n-j} in plaats van $f(x_{n-j},z_{n-j})$):

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{12} h(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}) \qquad \text{orde } 3$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{24} h(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) \qquad \text{orde } 4.$$

Dit zijn de zogenaamde Adams-Bashforth formules.

De corrector formule heeft de vorm

$$z_{n+1} = z_n + h \sum_{j=-1}^{k-1} c_j f(x_{n-j}, z_{n-j}) \; .$$

De orde van de globale afbreekfout van deze formule is (bij geschikte keuze van c_j) eveneens $k+1$.

Voorbeelden zijn:

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{12} h(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}) \qquad \text{orde } 3$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{24} h(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \qquad \text{orde } 4.$$

Dit zijn de zogenaamde Adams-Moulton formules.

Predictor-corrector methoden gebaseerd op bovenstaande formules worden speciaal gebruikt voor nauwkeurige integratie over grote trajecten waarbij verwacht wordt dat de stapgrootte niet gevarieerd behoeft te worden.

Opmerking. In de gevallen dat we weten wat de orde van de methode is kunnen we een schatting van de afbreekfout krijgen door benaderingen met verschillende stapgrootten te berekenen. Vervolgens kunnen we door extrapolatie een betere benadering krijgen (vergelijk hoofdstuk III, pag. 7 e.v.).

In bovenstaande voorbeelden geeft dit voor de oplossing bij $x = 1$:

Euler methode (pag. 8) $e \approx 0.003\,418$ $\quad z_{extrap} = 0.500\,224$.

Trapeziumregel (pag.11) $e \approx 0.000\,781$ $\quad z_{extrap} = 0.499\,988$.

5. Runge Kutta methoden

Een belangrijke klasse van eenstaps methoden voor het oplossen van het beginwaarde probleem

$$y' = f(x,y) \qquad x \ge x_0 \; , \qquad y(x_0) = y_0$$

vormen de zogenaamde Runge Kutta methoden.

Het idee van deze methoden is het volgende. Er geldt exact (middelwaarde stelling)

$$y_{n+1} = y_n + hf(\xi, y(\xi)) \ ,$$

waarbij $x_n < \xi < x_{n+1}$. Dus $f(\xi, y(\xi))$ is de richting waarlangs we van (x_n, y_n) naar (x_{n+1}, y_{n+1}) gaan.

Bij een Runge Kutta methode trachten we deze richting zo goed mogelijk te benaderen door $f(x,y)$ in enkele punten van het (x,y)-vlak in de buurt van $(\xi, y(\xi))$ te berekenen en van deze waarden een zodanig gemiddelde te nemen dat de orde van de afbreekfout zo hoog mogelijk is.

Enkele voorbeelden zijn:

1. Eerste orde formule

$$z_{n+1} = z_n + hf(x_n, z_n) \qquad \text{(Euler)}.$$

2. Tweede orde formule

$$k_0 = hf(x_n, z_n)$$

$$k_1 = hf(x_{n+1}, z_n + k_0)$$

$$z_{n+1} = z_n + \tfrac{1}{2}(k_0 + k_1) \ . \tag{6.15}$$

3. Derde orde formule

$$k_0 = hf(x_n, z_n)$$

$$k_1 = hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, z_n + \tfrac{1}{2}k_0)$$

$$k_2 = hf(x_{n+1}, z_n - k_0 + 2k_1)$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{6}(k_0 + 4k_1 + k_2) \ . \tag{6.16}$$

4. Vierde orde formule

$$k_0 = hf(x_n, z_n)$$

$$k_1 = hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, z_n + \tfrac{1}{2}k_0)$$

$$k_2 = hf(x_n + \tfrac{1}{2}h, z_n + \tfrac{1}{2}k_1)$$

$$k_3 = hf(x_{n+1}, z_n + k_2)$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3) \ . \tag{6.17}$$

Runge Kutta methoden zijn éénstaps methoden. Dit maakt ze zeer geschikt voor het integreren met variabele stapgrootte (vergelijk hoofdstuk III, par. 5). Er is in dit geval een manier om de locale afbreekfout te schatten die goedkoper is dan de methode van staphalvering, die beschreven is in hoofdstuk III, par. 5.

niet waar!

Het blijkt namelijk mogelijk te zijn de laatste meegenomen term ~~locale afbreekfout~~ te benaderen door middel van een lineaire combinatie $a_0k_0 + a_1k_1 + \ldots + a_mk_m$ waarbij m groter dan of gelijk aan het aantal termen in de Runge Kutta formule is.

<u>Voorbeelden</u>

Tweede orde methode

$$R \approx (k_1 - k_0)/2 . \tag{6.18}$$

Vierde orde methode

$$k_4 = hf(\overset{x_n+\frac{3}{4}h}{\cancel{x_{n+1}}}, z_n + (5k_0 + 7k_1 + 13k_2 - k_3)/32)$$

$$R \approx \frac{2}{3}(-k_0 + 3k_1 + 3k_2 + 3k_3 - 8k_4) . \tag{6.19}$$

Het bepalen van de stapgrootte wordt na iedere stap opnieuw gedaan op dezelfde manier als in hoofdstuk III, par. 5, namelijk als volgt.
Zij ε de maximaal toelaatbare fout per lengte-eenheid. Zij h_0 een schatting van de stapgrootte, dan berekenen we - in het geval van de vierde orde methode - $R(h_0) = \frac{2}{3}(-k_0 + 3k_1 + 3k_2 + 3k_3 - 8k_4)$. Omdat in dit geval geldt $R(h_0) \approx Ch_0^{5}$ (4) vinden we als schatting voor de volgende stapgrootte

ook fout

$$h_1 \leq h_0 \left(\frac{\varepsilon h_0}{|R(h_0)|} \right)^{\frac{1}{5}} .$$

Daarom nemen we, met een veiligheidsmarge van 10%

$$h_1 = 0.9h_0 \left(\frac{\varepsilon h_0}{|R(h_0)|} \right)^{\frac{1}{5}} . \tag{6.20}$$

Een ALGOL procedure gebaseerd op deze vierde orde Runge Kutta methode is de volgende.

```
procedure RUNGE KUTTA(x, a, b, y, ya, fxy, eps, h);
value a, b, ya, eps; real x, a, b, y, ya, fxy, eps, h, h0;
begin real x0, y0, k0, k1, k2, k3, k4, abs R; Boolean last;
      eps := eps/(b - a);
      x := x0 := a; y := y0 := ya;
L:    if x0 + h ≥ b then begin last := true; h0 := h; h := b - x0 end
                     else last := false;
      k0 := h × fxy;
      x := x0 + 0.5 × h; y := y0 + 0.5 × k0; k1 := h × fxy;
      y := y0 + 0.5 × k1; k2 := h × fxy;
      x := x0 + h; y := y0 + k2; k3 := h × fxy;
      y := y0 + (5 × k0 + 7 × k1 + 13 × k2 - k3)/32; k4 := h × fxy;
      abs R := abs(2 × (- k0 + 3 × (k1 + k2 + k3) - 8 × k4)/3);
      if abs R < h × eps then begin x0 := x;
                                    y := y0 := y0 + (k0 + 2 × (k1 + k2) + k3)/6;
                                    if last then goto END
                              end;
      h := 0.9 × h × (eps × h/abs R) ↑ 0.25; 1/3;
      goto L;
END:  h := h0
end RUNGE KUTTA
```

Opgave. Waarom is het zinvol de formele parameter h niet in de value lijst op te nemen? Wat is in dit verband de functie van de locale variabele h0 ?

Opmerking. Bij het gebruik van de Runge Kutta methoden wordt alleen rekening gehouden met de locale afbreekfout. De doorwerking daarvan wordt verwaarloosd en als totale fout wordt genomen de som van alle locale fouten. Dit kan bij sommige differentiaalvergelijkingen totaal verkeerde antwoorden opleveren.

6. Stelsels differentiaalvergelijkingen en differentiaalvergelijkingen van hogere orde

Alle tot nu toe behandelde numerieke methoden voor het oplossen van een eerste orde beginwaarde probleem zijn eveneens bruikbaar voor een beginwaarde probleem bestaande uit een stelsel van eerste orde differentiaalvergelijkingen en een stel beginvoorwaarden. We demonstreren dit aan de hand van een tweetal voorbeelden.

Voorbeeld. De formule van Euler.
Zij

$$y' = f(x,y,z)$$

$$z' = g(x,y,z)$$

een stelsel van twee differentiaalvergelijkingen voor de functies $y = y(x)$ en $z = z(x)$. Zij

$$y(x_0) = y_0$$

$$z(x_0) = z_0$$

de bijbehorende beginvoorwaarden waardoor de oplossing eenduidig bepaald is. De benadering voor $y(x_n)$ noemen we v_n en de benadering voor $z(x_n)$ noemen we w_n. Dan wordt de formule van Euler:

$$\begin{aligned} v_{n+1} &= v_n + hf(x_n,v_n,w_n) \\ w_{n+1} &= w_n + hg(x_n,v_n,w_n) \end{aligned} \qquad n = 0,1,2,\ldots$$

met de beginvoorwaarden

$$v_0 = y_0$$

$$w_0 = z_0 \ .$$

Voorbeeld. De tweede orde Runge Kutta formule.
Voor hetzelfde stelsel van twee differentiaalvergelijkingen wordt de tweede orde Runge Kutta formule:

$$k_{0v} = hf(x_n,v_n,w_n)$$

$$k_{0w} = hg(x_n,v_n,w_n)$$

$$k_{1v} = hf(x_{n+1}, v_n + k_{0v}, w_n + k_{0w})$$

$$k_{1w} = hg(x_{n+1}, v_n + k_{0v}, w_n + k_{0w})$$

$$v_{n+1} = v_n + \tfrac{1}{2}(k_{0v} + k_{1v})$$

$$w_{n+1} = w_n + \tfrac{1}{2}(k_{0w} + k_{1w}) \; .$$

Op dezelfde wijze kan een willekeurig stelsel van n differentiaalvergelijkingen met n onbekende functies

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dx} &= f_1(x, y_1, y_2, \ldots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dx} &= f_2(x, y_1, y_2, \ldots, y_n) \qquad x \geq x_0 \qquad (6.21) \\ &\;\vdots \\ \frac{dy_n}{dx} &= f_n(x, y_1, y_2, \ldots, y_n) \end{aligned}$$

met de beginvoorwaarden

$$y_i(x_0) = y_{i0} \qquad i = 1, 2, \ldots, n \qquad (6.22)$$

met een van de behandelde methoden opgelost worden.

Een hogere orde differentiaalvergelijking kan worden herleid tot een stelsel van eerste orde differentiaalvergelijkingen. Dit gebeurt op de volgende wijze:

Zij gegeven de n-de orde differentiaalvergelijking

$$y^{(n)} = F(x, y, y', \ldots, y^{(n-1)}) \qquad x \geq x_0$$

met de beginvoorwaarden

$$y^{(i-1)}(x_0) = \eta_i \qquad i = 1, 2, \ldots, n \; .$$

We voeren de volgende functies in

$$w_i(x) = y^{(i-1)}(x) \qquad i = 1, 2, \ldots, n \; .$$

Dan krijgen we het stelsel differentiaalvergelijkingen

$$\frac{dw_1}{dx} = w_2$$

$$\frac{dw_2}{dx} = w_3$$

$$\vdots \qquad (6.23)$$

$$\frac{dw_{n-1}}{dx} = w_n$$

$$\frac{dw_n}{dx} = F(x,w_1,w_2,\ldots,w_n)$$

met de beginvoorwaarden

$$w_i(x_0) = \eta_i \qquad i = 1,2,\ldots,n\ . \qquad (6.24)$$

<u>Voorbeeld</u>

$$y'' = (x + y)^2 - 2xyy'$$

$$y(0) = 1\ ,\quad y'(0) = 0\ .$$

Met $w_1 = y$ en $w_2 = y'$ krijgen we het stelsel

$$w_1' = w_2$$

$$w_2' = (x + w_1)^2 - 2xw_1w_2$$

met de beginvoorwaarden $w_1(0) = 1$ en $w_2(0) = 0$.

We behandelen nu nog een speciale methode voor de tweede orde differentiaalvergelijking van de vorm

$$y'' = f(x,y)\ , \qquad (6.25)$$

dus waarbij in het rechterlid y' ontbreekt.

Een voor de hand liggende methode ontstaat als we de tweede afgeleide in (6.25) vervangen door een tweede differentie. Zo ontstaat de formule

$$z_{n+1} - 2z_n + z_{n-1} = h^2 f(x_n,z_n) \qquad n = 1,2,\ldots\ . \qquad (6.26)$$

Als start voor deze formule nemen we

$$z_0 = y_0$$

$$z_1 = y_0 + hy_0' + \tfrac{1}{2}h^2 f(x_0,y_0) .$$

De globale afbreekfout van deze methode is $\mathcal{O}(h^2)$.

We kunnen de invloed van afrondingsfouten nog verminderen door te stellen $hv_{n+\frac{1}{2}} := z_{n+1} - z_n$ en met behulp daarvan (6.26) te vervangen door

$$\begin{aligned} v_{n+\frac{1}{2}} &= v_{n-\frac{1}{2}} + hf(x_n,z_n) \\ z_{n+1} &= z_n + hv_{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{6.27}$$

met als start

$$z_0 = y_0$$

$$v_{\frac{1}{2}} = y_0' + \tfrac{1}{2}hf(x_0,y_0) .$$

Dit is in feite een discretisatie van het stelsel

$$\frac{dy}{dx} = u$$

$$\frac{du}{dx} = f(x,y) .$$

<u>Opmerking</u>. Daar

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} = h^2 y_n'' + \frac{1}{12} h^4 y_n^{(4)} + \mathcal{O}(h^6) =$$

$$= h^2 y_n'' + \frac{1}{12} h^2 [y_{n+1}'' - 2y_n'' + y_{n-1}''] + \mathcal{O}(h^6)$$

kunnen we (6.25) ook discretiseren door

$$z_{n+1} - 2z_n + z_{n-1} = \frac{1}{12} h^2 [f(x_{n+1},z_{n+1}) + 10f(x_n,z_n) + f(x_{n-1},z_{n-1})] . \tag{6.28}$$

Dit is een impliciete formule waaruit z_{n+1} moet worden opgelost. Dit is eenvoudig (en expliciet) te doen als $f(x,y)$ lineair is in y. De startwaarde z_1 vinden we bijpassend op de volgende manier

$$y_1 - y_{-1} = 2hy_0' + \frac{1}{3} h^3 y_0''' + \mathcal{O}(h^5) =$$

$$= 2hy_0' + \frac{1}{6} h^2 (y_1'' - y_{-1}'') + \mathcal{O}(h^5) .$$

Dus

$$z_1 - z_{-1} = 2hy_0' + \frac{1}{6} h^2[f(x_1,z_1) - f(x_{-1},z_{-1})] \ . \tag{6.29}$$

Uit (6.28), genomen voor $n = 0$, en (6.29) berekenen we z_1 en z_{-1}.
Deze zogenaamde methode van Numerov heeft orde 4 en is vooral populair in de quantummechanica (Schrödinger vergelijking, deze is lineair).

7. Stabiliteit

Bij het numeriek oplossen van een probleem, in dit geval een beginwaarde probleem, worden per stap fouten gemaakt, nl. afbreekfouten en afrondingsfouten. Nu is het mogelijk dat deze fouten ieder voor zich klein zijn, maar dat ze zodanig doorwerken dat de fout in de oplossing van het probleem zeer groot is. Zelfs doet zich het verschijnsel voor dat het verkleinen van de fouten per stap een averechtse uitwerking heeft, nl. dat daardoor de fout in het resultaat vergroot wordt.
Als dit laatste verschijnsel zich voordoet dan zegt men dat de numerieke methode <u>instabiel</u> is. In het geval dat kleine fouten geen grote gevolgen hebben, zeggen we dat de gebruikte methode <u>stabiel</u> is.

We zullen geen definitie geven van stabiliteit en instabiliteit maar we zullen deze begrippen toelichten aan de hand van een aantal voorbeelden.

Ter inleiding eerst het volgende voorbeeld.

<u>Voorbeeld.</u>

$$y' = y - x \ , \quad y(0) = 1 \ .$$

De exacte oplossing van dit beginwaarde probleem is $y = x + 1$. Als $y(0) = 1 + \varepsilon$ (wat we kunnen opvatten als de beginvoorwaarde is onnauwkeurig bekend), dan is de bijbehorende (exacte) oplossing $y = x + 1 + \varepsilon e^x$. Dus door een kleine verandering in de beginvoorwaarde wordt de term εe^x geïntroduceerd. Deze term groeit veel harder dan $x + 1$ en zal vrij snel de oorspronkelijke oplossing $x + 1$ volledig verdringen.
Men zegt in dit geval dat het probleem <u>slecht geconditioneerd</u> (Engels: <u>ill-conditioned</u>) is. Iedere numerieke methode zal falen om een nauwkeurige oplossing te bepalen. Men noemt dit verschijnsel ook wel <u>inherente instabiliteit</u>.

Opgave. Ga na dat het volgende beginwaarde probleem een slecht geconditioneerd probleem is:

$$y'' = y\ ,\quad y(0) = 1\ ,\quad y'(0) = -1\ .$$

In het volgende zullen we van een aantal methoden nagaan of ze numeriek stabiel of instabiel zijn. We doen dit aan de hand van een speciaal geval, nl. het beginwaarde probleem

$$y' = Ay\ ,\quad y(0) = 1\ . \tag{6.30}$$

Hiervan is de oplossing

$$y = e^{Ax}\ . \tag{6.31}$$

Allereerst de methode van Euler:

$$z_{n+1} = z_n + Ahz_n\ ,\quad z_0 = 1\ .$$

Deze differentievergelijking heeft als oplossing (vergelijk pag. 6)

$$z_n = (1 + Ah)^n\ . \tag{6.32}$$

Voor een vast punt $x = x_n$ geldt

X

$$z_n = e^{Ax+\mathcal{O}(h)}\ .$$

Hieruit volgt dat in een vast punt x

$$\lim_{h\to 0} z_n(x) = y(x)\ .$$

De oplossing van de differentievergelijking convergeert naar de oplossing van de differentiaalvergelijking; de globale afbreekfout gaat naar nul voor $h \to 0$.

De invloed van afrondingsfouten op de berekende waarde van z_n kunnen we als volgt nagaan. Zij ε_j de afrondingsfout die bij de berekening van z_j uit z_{j-1} gemaakt wordt, dan geldt

$$z_{n+1} = (1 + Ah)z_n + \varepsilon_{n+1}\ ,\quad z_0 = 1\ . \tag{6.33}$$

De oplossing van deze inhomogene differentievergelijking is

$$z_n = (1 + Ah)^n + \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j (1 + Ah)^{n-j}\ . \tag{6.34}$$

Dus de globale afrondingsfout F is gelijk aan

$$F := \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j (1 + Ah)^{n-j} \; .$$

Als we veronderstellen dat de locale afrondingsfouten voldoen aan $|\varepsilon_j| \le \varepsilon$ voor alle j, dan geldt voor $1 + Ah > 0$

$$|F| \le \varepsilon \sum_{j=1}^{n} (1 + Ah)^{n-j} = \varepsilon \, \frac{(1 + Ah)^n - 1}{Ah} \; .$$

We kunnen deze schatting nog wat verfraaien door gebruik te maken van de ongelijkheid $(1 + Ah)^n < e^{Ax_n}$ (zie pag. 6). We vinden dan

$$|F| \le \varepsilon \, \frac{e^{Ax_n} - 1}{Ah} \approx n\varepsilon \qquad (6.35)$$

voor h voldoende klein.

De invloed van de afrondingsfouten is niet groter dan we minimaal verwachten. Daarom is de methode van Euler stabiel,

Opgave. Ga na dat de afbreekfout en de afrondingsfout bij de trapeziumregel zodanig is dat deze methode eveneens convergent en stabiel is.

De gemodificeerde Euler methode:

$$z_{n+1} = z_{n-1} + 2Ahz_n$$

$$z_0 = 1 \; , \quad z_1 = y_0 + hy_0' + \frac{h^2}{2} y_0'' = 1 + Ah + \frac{A^2h^2}{2} \; . \qquad (6.36)$$

De algemene oplossing van de differentievergelijking

$$z_{n+1} - 2Ahz_n - z_{n-1} = 0$$

is

$$z_n = \alpha\lambda_1^n + \beta\lambda_2^n \qquad (6.37)$$

waarbij λ_1 en λ_2 de wortels zijn van de karakteristieke vergelijking

$$\lambda^2 - 2Ah\lambda - 1 = 0 \; .$$

Dus

$$\lambda_1 = Ah + \sqrt{1 + A^2h^2} = 1 + Ah + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\lambda_2 = Ah - \sqrt{1 + A^2h^2} = -1 + Ah + \mathcal{O}(h^2) \; .$$

De term $\alpha\lambda_1^n$ in (6.37) correspondeert met de exacte oplossing van de differentiaalvergelijking en convergeert ook naar de exacte oplossing, aangenomen dat $\alpha = 1$ (vergelijk (6.32)). De term $\beta\lambda_2^n$ is een zogenaamde parasitaire oplossing van de differentievergelijking, die optreedt omdat de orde van de differentievergelijking hoger is dan de orde van de differentiaalvergelijking.
Uit de beginvoorwaarden (6.36) volgt

$$\alpha = 1 + \mathcal{O}(h^4) \ , \quad \beta = \mathcal{O}(h^4)$$

dus de parasitaire oplossing heeft slechts een kleine coëfficiënt.

Voor $A > 0$ gaat de exacte oplossing e^{Ax} en ook de term $\alpha\lambda_1^n$ naar oneindig als $x \to \infty$, resp. $n \to \infty$, terwijl de parasitaire oplossing naar nul toegaat.
Voor $A < 0$ gaan e^{Ax} en $\alpha\lambda_1^n$ naar nul terwijl λ_2^n oscillerend naar oneindig toegaat, want $\lambda_2^n \approx (-1)^n(1 + |A|h)^n$. Voor grote waarden van x zal de parasitaire oplossing overheersen. Daarom is deze methode niet geschikt om een differentiaalvergelijking over een grote afstand te integreren.
Echter in een vast punt $x = x_n$ is λ_2^n begrensd, nl. $|\lambda_2^n| \leq e^{|A|x}$. Hieruit volgt dat geldt

$$\lim_{h\to 0} z_n(x) = \lim_{h\to 0} [(1 + O(h^4))\lambda_1^n + O(h^4)\lambda_2^n] = e^{Ax} \ .$$

Dus ook de gemodificeerde methode van Euler is convergent.

De convergentie van de methode volgt uit het feit dat $\beta \to 0$ als $h \to 0$.
Dit geldt als er geen afrondingsfouten gemaakt worden. Als we wel rekening houden met afrondingsfouten dan zal niet meer gelden dat $\beta \to 0$ als $h \to 0$.
X Tengevolge daarvan zal, in het geval $A < 0$, de parasitaire oplossing op den duur gaan overheersen. In een vast punt x zal de afrondingsfout echter begrensd blijven, daar λ_2^n begrensd is. Op grond hiervan wordt de gemodificeerde methode van Euler zwak instabiel genoemd.

Opgave. Ga na dat de methode van Milne eveneens zwak instabiel is.

Tenslotte nog een voorbeeld van een sterk instabiele methode.

We nemen als benadering voor $y' = f(x,y)$ de volgende formule:

$$z_{n+1} = 6z_n - 5z_{n-1} - h[f(x_n,z_n) + 3f(x_{n-1},z_{n-1})] \ . \qquad (6.38)$$

Men kan bewijzen dat de locale afbreekfout $\mathcal{O}(h^3)$ is.

Voor het speciale geval (6.30) krijgen we de volgende lineaire differentievergelijking (we nemen A = 1)

$$z_{n+1} - (6 - h)z_n + (5 + 3h)z_{n-1} = 0 \; . \tag{6.39}$$

Passen we deze formule toe met voor h achtereenvolgens de waarden 0.2, 0.1 en 0.05, dan krijgen we als benaderingen voor $y(x) = e^x$, $0 \le x \le 0.8$,

x_n	$z_n(0.2)$	$z_n(0.1)$	$z_n(0.05)$	e^x
0	1	1	1	1
0.05			1.051 271	
0.1		1.105 171	1.105 062	
0.15			1.161 073	
0.2	1.221 403	1.220 509	1.217 315	1.221 403
0.25			1.263 498	
0.3		1.343 597	1.248 641	
0.35			0.922 399	
0.4	1.484 137	1.458 524	-0.942 227	1.491 825
0.45			-10.356 606	
0.5		1.484 228	-56.769 337	
0.55			-284.441 034	
0.6	1.768 138	1.026 768	-1400.062 066	1.822 119
0.65			-6865.497 968	
0.7		-1.808 477	-33 639.393 270	
0.75			-164 797.075 422	
0.8	1.944 033	-16.111 884	-807 299.723 420	2.225 541

Om na te gaan wat hier aan de hand is zoeken we de oplossing van (6.39).
We bepalen daartoe eerst de oplossing die behoort bij h = 0. Dan is de karakteristieke vergelijking $\lambda^2 - 6\lambda + 5 = 0$ en de wortels van deze vergelijking zijn $\lambda_1 = 1$ en $\lambda_2 = 5$.
De wortels van de karakteristieke vergelijking behorende bij (6.39) zijn dan

$$\lambda_1 = 1 + \mathcal{O}(h)$$

$$\lambda_2 = 5 + \mathcal{O}(h)$$

en de algemene oplossing van (6.39) is

$$z_n = \alpha\lambda_1^n + \beta\lambda_2^n .$$

De term $\alpha\lambda_1^n$ correspondeert weer met de exacte oplossing van de differentiaalvergelijking. De term $\beta\lambda_2^n$ is een parasitaire oplossing die in dit geval echter sterk dominant is, $\lambda_2^n \approx 5^n$. Ook geldt niet dat λ_2^n in een vast punt begrensd is als $h \to 0$, in tegendeel $\lambda_2^n \to \infty$ als $h \to 0$. Onder alle omstandigheden zal de parasitaire oplossing overheersen, d.w.z. zal vanaf zekere n gelden $z_n \approx \beta\lambda_2^n$. Voor een vast punt $x = x_n$ zal dit effect eerder optreden naarmate h kleiner wordt.
In bovenstaand voorbeeld merken we op dat in de kolom van $z_n(0.05)$ opvolgende getallen ongeveer een factor 5 groter worden, in overeenstemming met het feit dat $\lambda_2 \approx 5$.

Een methode die het hier geschetste gedrag vertoont noemen we <u>sterk instabiel</u>. Het is duidelijk dat een dergelijke methode volkomen onbruikbaar is.

<u>Opgave</u>. Ga van elk van de volgende drie differentievergelijkingen na of deze aanleiding geeft tot een sterk instabiele methode.

a) $$-\frac{1}{2} z_{n+1} + 2z_n - \frac{3}{2} z_{n-1} = hf(x_{n-1},z_{n-1}) ;$$

b) $$z_{n+1} - \frac{3}{2} z_n + \frac{1}{2} z_{n-1} = h[\frac{5}{4} f(x_n,z_n) - \frac{3}{4} f(x_{n-1},z_{n-1})] ;$$

c) $$z_{n+1} + z_n - 2z_{n-1} = h[\frac{5}{2} f(x_n,z_n) + \frac{1}{2} f(x_{n-1},z_{n-1})] .$$

Verifieer Uw antwoord numeriek door bij het beginwaarde probleem $y' = y$, $y(0) = 1$ benaderingen voor de oplossing $y(x)$, $x = 0(h)1$, te berekenen voor $h = 0.2$, 0.1 en 0.05.
Ga na dat de locale afbreekfout in elk van de drie gevallen $\mathcal{O}(h^3)$ is.

<u>Opmerking</u>. De methoden van Runge Kutta en de methoden van Adams zijn stabiel. In het algemeen geldt dat methoden behorende bij een differentievergelijking van de vorm

$$z_{n+1} = z_n + h\Phi ,$$

waarbij Φ de som is van een aantal waarden van het rechterlid, stabiel zijn omdat alle parasitaire oplossingen klein zijn.

Opgave. Ga voor de Adams-Moulton formule

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{12} h(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$$

na dat de bijbehorende methode stabiel is.

Opmerking. We hebben, bij het onderzoeken of een methode stabiel is, ons beperkt tot het speciale geval van de lineaire differentiaalvergelijking (6.30). De vraag is of de verkregen resultaten ook gelden voor de algemene differentiaalvergelijking $y' = f(x,y)$. We verwachten dit wel omdat in een omgeving van een punt (x_0,y_0) de differentiaalvergelijking bij benadering lineair is,

$$y' = f(x,y_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_0 (y - y_0) + \dots .$$

8. Numerieke oplossing van randwaarde problemen

In deze paragraaf behandelen we de numerieke oplossing van het tweede orde randwaarde probleem

$$y'' = f(x,y,y') , \qquad a < x < b \tag{6.40}$$

$$\left.\begin{aligned} y(a) &= \alpha \\ y(b) &= \beta . \end{aligned}\right. \tag{6.41}$$

Bij een beginwaarde probleem van de tweede orde is door twee beginvoorwaarden de oplossing eenduidig vastgelegd. Bij een randwaarde probleem behoeft dit niet het geval te zijn. Een voorbeeld waarbij de twee randvoorwaarden de oplossing niet eenduidig bepalen is het volgende:

$$y'' + y = 0 , \quad y(0) = 0 , \quad y(\pi) = \beta .$$

Nemen we $\beta \neq 0$ dan heeft dit randwaarde probleem geen oplossing.
Nemen we $\beta = 0$ dan heeft dit randwaarde probleem oneindig veel oplossingen. De randvoorwaarden zijn in dit geval niet onafhankelijk. Als de randvoorwaarden wel onafhankelijk zijn, dan heeft het randwaarde probleem precies één oplossing.

Een methode om een randwaarde probleem op te lossen krijgen we door het probleem te herleiden tot een beginwaarde probleem

$$y'' = f(x,y,y') \ , \qquad x > a$$
$$y(a) = \alpha \qquad (6.42)$$
$$y'(a) = \eta \ .$$

De opgave is nu de waarde van η zodanig te bepalen dat $y(b) = \beta$. We kunnen dit ook als volgt formuleren.
Bij iedere η heeft (6.42) een oplossing $y(x,\eta)$. De waarde van η is de oplossing van de vergelijking

$$y(b,\eta) = \beta \ . \qquad (6.43)$$

Het oplossen van deze vergelijking kan bijvoorbeeld met de Regula Falsi geschieden (zie hoofdstuk VII).
Deze methode die ook wel "<u>schieten</u>" genoemd wordt kan erg omvangrijk zijn omdat het beginwaarde probleem een aantal keren moet worden opgelost.
Echter als de differentiaalvergelijking <u>lineair</u> is kunnen we volstaan met tweemaal schieten, omdat (6.43) in dat geval een lineaire functie van η is.
Met een kleine modificatie gaat het in dit geval als volgt.
De lineaire differentiaalvergelijking is

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = r(x) \ . \qquad (6.44)$$

Neem als beginvoorwaarden

$$y(a) = \alpha$$
$$y'(a) = 1 \ ,$$

dan krijgen we als oplossing de functie $y_1(x)$.
Los vervolgens op het beginwaarde probleem bestaande uit de bij (6.44) behorende homogene differentiaalvergelijking

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = 0$$

met als beginvoorwaarden

$$y(a) = 0$$
$$y'(a) = 1 \ ,$$

dan krijgen we de oplossing $y_2(x)$.
De gezochte oplossing is dan

$$y(x) = y_1(x) + \eta y_2(x)$$

waarbij η zodanig is dat $y(b) = \beta$, dus

$$\eta = \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} .$$

Hiermee is het randwaarde probleem opgelost, mits $y_2(b) \neq 0$. Als $y_2(b) = 0$ of bijna nul, dan is de oplossing niet of slecht bepaald.

Een geheel andere methode krijgen we door het randwaarde probleem te discretiseren. We beperken ons hierbij tot het lineaire geval, dus tot het randwaarde probleem

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = r(x) , \qquad a < x < b$$

$$y(a) = \alpha$$

$$y(b) = \beta .$$

We verdelen het interval $[a,b]$ in n gelijke stukken ter lengte $h = (b - a)/n$. Zij $x_j = a + jh$, $p_j = p(x_j)$, etc., en zij z_j de benadering voor $y(x_j)$. We vervangen de afgeleiden in de differentiaalvergelijking door centrale differenties

$$y'(x_j) = \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$y''(x_j) = \frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

en krijgen dan de differentievergelijking

$$-(1 - \tfrac{1}{2}hp_j)z_{j-1} + (2 - h^2q_j)z_j - (1 + \tfrac{1}{2}hp_j)z_{j+1} = -h^2r_j$$

voor $j = 1,2,\ldots,n-1$. Omdat $z_0 = \alpha$ en $z_n = \beta$ levert dit het volgende stelsel van n-1 vergelijkingen met n-1 onbekenden

$$Az = d \qquad (6.45)$$

waarin

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & -c_1 & & & \\ -b_1 & a_2 & -c_2 & & \bigcirc \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{n-2} & -c_{n-2} \\ \bigcirc & & & -b_{n-2} & a_{n-1} \end{pmatrix} , \quad z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{n-1} \end{pmatrix} , \quad d = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \end{pmatrix}$$

met

$$a_j = 2 - h^2 q_j \qquad d_1 = (1 - \tfrac{1}{2}hp_1)\alpha - h^2 r_1$$

$$b_{j-1} = 1 - \tfrac{1}{2}hp_j \qquad d_j = -h^2 r_j$$

$$c_j = 1 + \tfrac{1}{2}hp_j \qquad d_{n-1} = (1 + \tfrac{1}{2}hp_{n-1})\beta - h^2 r_{n-1}\ .$$

De coëfficiëntenmatrix A is een zogenaamde tridiagonaalmatrix; alleen de elementen op de hoofddiagonaal en de beide aangrenzende nevendiagonalen zijn niet nul.

We lossen (6.45) op met behulp van de eliminatiemethode van Gauss. Daarbij transformeren we eerst het stelsel (6.45), door eliminatie van de b_j, in het stelsel

$$\begin{pmatrix} u_1 & -c_1 & & & \\ & u_2 & -c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & -c_{n-2} \\ & & & & u_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ z_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ e_{n-1} \end{pmatrix}$$

waarna de waarden van $z_{n-1}, z_{n-2}, \ldots, z_1$ achtereenvolgens berekend kunnen worden.

In ALGOL ziet deze algoritme er als volgt uit: zonder rij verwisseling.

```
u[1] := a[1]; e[1] := d[1];
for j := 2 step 1 until n-1 do
begin ℓ := b[j-1]/u[j-1];
      u[j] := a[j] - ℓ × c[j-1];
      e[j] := d[j] + ℓ × e[j-1]
end;
z[n-1] := e[n-1]/u[n-1];
for j := n-2 step -1 until 1 do z[j] := (e[j] + c[j] × z[j+1])/u[j]
```

Men kan bewijzen dat de afbreekfout van deze methode $O(h^2)$ is. Precieser gezegd: er geldt in een vast punt $x = x_i$

$$y(x_i) = z_i + \mathcal{O}(h^2)\ , \qquad h \to 0\ .$$

Dus kunnen we hier weer een schatting van de fout krijgen door benaderingen te berekenen voor h en voor $\frac{1}{2}h$, en vervolgens kunnen we door h^2-extrapolatie een betere benadering voor de oplossing verkrijgen.

Voorbeeld.

$$y'' - y = x$$

$$y(0) = 0 \;, \quad y(1) = 0.175\,201 \;.$$

De exacte oplossing hiervan is (daar $0.175\,201 \doteq -1 + \sinh 1$)

$$y(x) = -\,x + \sinh x \;.$$

Met behulp van discretisatie vinden we de volgende benaderingen

$$h = 0.5 \qquad a_1 = 2.25 \qquad d_1 = 0.050\,201 \qquad z_1 = 0.022\,311 \;.$$

$h = 0.25$

i	b_{i-1}	a_i	c_i	d_i	u_i	e_i	z_i
1		2.0625	1	-0.015 625	2.0625	-0.015 625	0.002 802
2	1	2.0625	1	-0.031 250	1.577 652	-0.038 826	0.021 405
3	1	2.0625		0.128 326	1.428 647	0.103 716	0.072 597

$h = 0.125$

i	b_{i-1}	a_i	c_i	d_i	u_i	e_i	z_i
1		2.015 625	1	-0.001 953	2.015 625	-0.001 953	0.000 351
2	1	2.015 625	1	-0.003 906	1.519 501	-0.004 875	0.002 662
3	1	2.015 625	1	-0.005 859	1.357 515	-0.009 067	0.008 920
4	1	2.015 625	1	-0.007 812	1.278 985	-0.014 491	0.021 177
5	1	2.015 625	1	-0.009 765	1.233 756	-0.021 095	0.041 577
6	1	2.015 625	1	-0.011 718	1.205 092	-0.028 816	0.072 391
7	1	2.015 625		0.161 530	1.185 813	0.137 619	0.116 054

In het punt $x = 0.5$ vinden we door h^2-extrapolatie

h	$z_n(0.5)$	
0.5	0.022 311	
0.25	0.021 405	0.021 103
0.125	0.021 177	0.021 101 .

Dit resultaat is in 5 decimalen correct, want de exacte waarde is $y(0.5) = -\,0.5 + \sinh(0.5) = 0.021\,095$.

Cursus Wetenschappelijk Rekenaar A te Eindhoven

Hoofdstuk VI. Numerieke integratie van differentiaalvergelijkingen.

1. Gegeven

$$\begin{cases} y' = 1 + y^2 \\ y(0) = 0. \end{cases}$$

Bereken y(0.2) in 7 decimalen nauwkeurig met behulp van de Taylorreeks.

2. Gegeven

$$\begin{cases} y' = 1 + y^2 \\ y(0) = 0. \end{cases}$$

a) Bereken y(0.6) met de gemodificeerde methode van Euler.
Neem achtereenvolgens h = 0.2, 0.1, 0.05.
Start met $y(h) = y(0) + hy'(0) + h^2 y''(0)$.
Voer de berekeningen uit in 6 decimalen.

b) Bepaal, aan de hand van de numerieke resultaten, de orde van de globale afbreekfout.
Bereken vervolgens een zo nauwkeurig mogelijke benadering voor y(0.6) met behulp van extrapolatie. Vergelijk dit met de exacte waarde.

c) Herhaal a) voor het probleem

$$\begin{cases} y' = 1 + y^2 \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

Bepaal weer de orde van de globale afbreekfout. Vergelijk dit met b) en verklaar het verschil.

3. Gegeven

$$\begin{cases} y' = x - y^2 \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

a) Bereken y(0.4) met behulp van de volgende methode

$$z_n^* := z_{n-1} + h\, f(x_{n-1}, z_{n-1})$$

$$z_n := z_{n-1} + \frac{h}{2}[f(x_{n-1}, z_{n-1}) + f(x_n, z_n^*)].$$

Neem h achtereenvolgens 0.2, 0.1, 0.05, 0.025. Voer de berekeningen uit in 8 decimalen.

b) Bepaal de orde van de globale afbreekfout en pas extrapolatie toe. Bepaal de orde van de globale fout in de geëxtrapoleerde waarden en extrapoleer eventueel nogmaals.

4. a) Schrijf een procedure RK2(x,y,z,fxyz,gxyz,x0,y0,z0,h,xe) voor het integreren van

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,y,z) \\ \frac{dz}{dx} = g(x,y,z) \end{cases}$$

met beginvoorwaarden

$$y(0) = y_0 \ , \quad z(0) = z_0 \ .$$

Gebruik de tweede orde Runge Kutta formule met vaste stapgrootte h.

b) Test de procedure.

c) Gegeven het stelsel

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = (x + e^{-z})y \\ \frac{dz}{dx} = \sin xz + y \ , \end{cases}$$

$$y(0) = z(0) = 1 \ .$$

Bereken met behulp van de procedure RK2 $y(1) = z(1)$ met $h = .2, .1, .05, .025, .0125$.

Bepaal aan de hand van Uw numerieke resultaten de orde van de globale fout en pas extrapolatie toe. Herhaal dit.

5. Gegeven de differentiaalvergelijking

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \ . \tag{1}$$

a) Bepaal a, b, c en d zodanig dat in de formule

$$y_i' = ay_{i+1} + by_i + cy_{i-1} + dy_{i-2} + R(y,h)$$

R gelijk is aan nul voor polynomen van zo hoog mogelijke graad.

Onderstel $R(y,h) = Ch^p y^{(q)}(\xi)$, bepaal dan C, p en q.

b) Gebruik het resultaat van a) om een formule af te leiden voor numerieke integratie van (1).

c) Pas de formule afgeleid onder b) toe voor numerieke integratie van de differentiaalvergelijking

$$\frac{dy}{dx} = -y\,, \quad y(0) = 1\,.$$

Bereken benadering voor y(1) met

(i) $h = 0.1$,

(ii) $h = 0.05$.

Voer Uw berekeningen uit in 4 decimalen en neem de startwaarden in 4 decimalen nauwkeurig.

d) Verklaar de numerieke resultaten onder c) verkregen, aan de hand van de oplossing van de differentievergelijking die U onder c) gebruikte.

6. Gegeven $y'' + y = 0$, $y(0) = 0$, $y(1) = 0.841471$.
Bereken door discretisatie de oplossing in de punten $x = 0(0.2)1$ in 5 decimalen nauwkeurig.

Aanvulling Hoofdstuk VI. Numerieke integratie van differentiaalvergelijkingen.

1. Gegeven de differentiaalvergelijking

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \; .$$

a) Bepaal de constanten a, b, c, d en e in de formule

$$y_{n+1} = ay_n + bf_n + cf_{n-1} + df_{n-2} + ef_{n-3} + R \qquad (1)$$

zodanig dat R = 0 voor polynomen van zo hoog mogelijke graad. ($f_n := f(x_n,y_n)$). Herkent U deze formule?

b) Bepaal R met behulp van Taylorreeksontwikkeling.

2. Leid de tweede orde RUNGE KUTTA formule (6.15) af. Doe dit als volgt: Stel

$$z_{n+1} := z_n + a_0k_0 + a_1k_1 \; ,$$

met

$$k_0 := hf(x_n,z_n) \; ,$$

$$k_1 := hf(x_n + ph, z_n + qk_0) \; .$$

Bepaal de getallen p, q, a_0 en a_1 zodanig, dat de locale afbreekfout een zo hoog mogelijke orde heeft.

3. Gegeven de differentiaalvergelijking

$$\frac{dy}{dx} = x^2 - y$$

$$y(0) = 1 \; . \qquad (1)$$

a) Bepaal analytisch de oplossing van (1).

b) Bereken y(.5) met de formule van Euler. Kies achtereenvolgens h = .1, h = .05.

c) Los de onder b) gebruikte differentievergelijking exact op.

(Oplossing: $z_k = x_k^2 - 2x_k + 2 - h - (1-h)^{1+x_k/h}$, $h \geq 0$.)

Bewijs dat voor de globale fout $e(x_k)$ geldt

$$e(x_k) = \beta h + O(h^2) .$$

4. Gegeven is de differentiaalvergelijking

$$y'' + xy' - y = 1 , \quad y(0) = y(1) = 0 .$$

Bereken de oplossing in de punten $x = 0\ (0.25)\ 1$ in 4 decimalen nauwkeurig.

```
procedure Runge Kutta (x, y, fxy, d, eps, h);
value d, eps; real x, y, fxy, d, eps, h;
begin real xo, yo, ko, k1, k2, k3, k4, ho, b, abR;
   Boolean last;
```

```
procedure Runge Kutta (x, y, fxy, x0, yo, b, ae, re, h);
value b, ae, re; real x, y ..., h;

begin real y1, ko t/m k4 z, abR; Boolean last.
last := false; b := xo + d;
do begin if xo + h ≥ b then begin last := true; h := b - xo end;
                     else last := false;
        x := xo; y := yo; ko := h * fxy;
        x := xo + 0.5 * h; y := yo + 0.5 * ko; k1 := h * fxy;
        y := yo + 0.5 * k1; k2 := h * fxy;
        x := xo + h; y := yo + k2; k3 := h * fxy.
        y1 := y := yo + (5 * ko + 7 * k1 + 13 * k2 - k3)/32; k4 := h * fxy;
        abR := abs (2/3 (-ko ---  - 8 k4);
        if abR < h * (ae + re * |y1|)
        then begin xo := xo + h; yo := y1 end
        else last := false;
        if ¬ last then h := h * (     )^(1/3)
   end
until last
end
```

$$y' = \frac{1}{1+y^2}$$

$$(1+y^2)\, y' = x$$

$$y + \frac{1}{3} y^3 = \frac{1}{2} x^2$$

GØ AHEAD

Zonder h gezet op het
einde vd procedure

```
LIS
'BEGIN''REAL'X,Y,X0,Y0,D,AE,RE,H;
    'INTEGER'I;
    'BØØLEAN'ØUTPUT;
    'REAL''PRØCEDURE' F(X,Y);
    'VALUE'X,Y;'REAL'X,Y;
    F:=-2*X*Y↑2;

    'PRØCEDURE'RUNGE KUTTA(X,Y,FXY,X0,Y0,D,AE,RE,H);
    'VALUE'D,AE,RE;  'REAL'X,Y,FXY,X0,Y0,D,AE,RE,H;
    'BEGIN''REAL'B,K0,K1,K2,K3,K4,ABSR;
            'REAL'Y1,TØL;
            'BØØLEAN'LAST;
       LAST:='FALSE'; B:=X0+D;
    DØ:'BEGIN''IF'X0+H>=B'THEN''BEGIN'LAST:='TRUE'; H:=B-X0'END';
          X:=X0; Y:=Y0; K0:=H*FXY;
          X:=X0+0.5*H; Y:=Y0+0.5*K0; K1:=H*FXY;
                       Y:=Y0+0.5*K1; K2:=H*FXY;
          X:=X0+H;     Y:=Y0+K2;     K3:=H*FXY;
          X:=X0+.75*H;
          Y:=Y0+(5*K0+7*K1+13*K2-K3)/32; K4:=H*FXY;
          Y1:=Y0+(K0+2*(K1+K2)+K3)/6;
          ABSR:=ABS(2*(-K0+3*(K1+K2+K3)-8*K4)/3);
          TØL:=H*(AE+RE*ABS(Y1));
          'IF'ABSR<TØL
          'THEN''BEGIN'X0:=X0+H;Y0:=Y1'END'
          'ELSE'LAST:='FALSE';
          'IF''NØT'LAST'THEN'H:=0.9*H*(TØL/ABSR)↑(1/3)
       'END';
       'IF'ØUTPUT'THEN'
       'BEGIN'NLCR; FLØT(9,2,X0); FLØT(9,2,Y0);
          FLØT(6,2,H); FLØT(6,2,ABSR); FLØT(6,2,TØL)
       'END';
    UNTIL:'IF''NØT'LAST'THEN''GØTØ'DØ
    'END'RUNGE KUTTA;

    X0:=READ; Y0:=READ; D:=READ;
    H:=D;
    AE:=READ; RE:=READ;
    ØUTPUT:=READ=0;
    NLCR; PRINTTEXT('('  X')'); SPACE(19); PRINTTEXT('('Y')');
    NLCR;
    NLCR; FLØT(9,2,X0); FLØT(9,2,Y0);
    'FØR'I:=1'STEP'1'UNTIL'10'DØ'
    'BEGIN'RUNGE KUTTA(X,Y,F(X,Y),X0,Y0,D,AE,RE,H);
       NLCR; FLØT(9,2,X0); FLØT(9,2,Y0)
    'END'
'END'

GØ AHEAD
```

$y = x^Y$ zonder h gered

```
0060    F:=4*X↑3;
RUN
WAIT
0,0,0.1,'-4,'-4,0,

  X                       Y


          0               0
          0               0     +.417757'- 1 +.100000'- 3 +.100010'- 4
+.417756917'- 1 +.304575241'- 5 +.417743'- 1 +.304575'- 5 +.417758'- 5
+.835500339'- 1 +.487288904'- 4 +.417750'- 1 +.304536'- 5 +.417764'- 5
+.100000000'+ 0 +.999999999'- 4 +.164500'- 1 +.732252'- 7 +.164516'- 5
+.100000000'+ 0 +.999999999'- 4
+.116449966'+ 0 +.183889725'- 3 +.417768'- 1 +.732252'- 7 +.164530'- 5
+.158226801'+ 0 +.626787308'- 3 +.417831'- 1 +.304608'- 5 +.418030'- 5
+.200000000'+ 0 +.159999999'- 2 +.417732'- 1 +.304501'- 5 +.418400'- 5
+.200000000'+ 0 +.159999999'- 2
+.241773198'+ 0 +.341690280'- 2 +.418219'- 1 +.304502'- 5 +.419159'- 5
+.283595060'+ 0 +.646836696'- 2 +.418642'- 1 +.305924'- 5 +.420924'- 5
 .300000000'+ 0 +.810000005'- 2 +.164049'- 1 +.724297'- 7 +.165378'- 5
+.300000000'+ 0 +.810000005'- 2
+.316404940'+ 0 +.100224298'- 1 +.419128'- 1 +.724297'- 7 +.165694'- 5
+.358317746'+ 0 +.164844049'- 1 +.420024'- 1 +.308598'- 5 +.426037'- 5
+.400000000'+ 0 +.256000001'- 1 +.416823'- 1 +.301842'- 5 +.427493'- 5
+.400000000'+ 0 +.256000001'- 1
+.441682254'+ 0 +.380574602'- 1 +.422978'- 1 +.301857'- 5 +.432686'- 5
+.483980016'+ 0 +.548668114'- 1 +.425251'- 1 +.320080'- 5 +.446185'- 5
+.500000001'+ 0 +.625000006'- 1 +.160200'- 1 +.657359'- 7 +.170212'- 5
+.500000001'+ 0 +.625000006'- 1
+.516019985'+ 0 +.709032413'- 1 +.426998'- 1 +.660463'- 7 +.171559'- 5
+.558719789'+ 0 +.974487374'- 1 +.430866'- 1 +.332498'- 5 +.468608'- 5
+.600000001'+ 0 +.129600000'+ 0 +.412802'- 1 +.290417'- 5 +.466301'- 5
+.600000001'+ 0 +.129600000'+ 0
+.641280212'+ 0 +.169118592'+ 0 +.440058'- 1 +.290417'- 5 +.482615'- 5
+.685286056'+ 0 +.220540106'+ 0 +.446411'- 1 +.375075'- 5 +.537109'- 5
+.700000000'+ 0 +.240100001'+ 0 +.147139'- 1 +.468766'- 7 +.182468'- 5
+.700000000'+ 0 +.240100001'+ 0
+.714713945'+ 0 +.260933010'+ 0 +.450798'- 1 +.470318'- 7 +.185533'- 5
 .759793696'+ 0 +.333259658'+ 0 +.459788'- 1 +.412948'- 5 +.601030'- 5
+.800000000'+ 0 +.409600001'+ 0 +.402063'- 1 +.261329'- 5 +.566748'- 5
+.800000000'+ 0 +.409600001'+ 0
+.840206304'+ 0 +.498360649'+ 0 +.478056'- 1 +.261267'- 5 +.602435'- 5
+.888011888'+ 0 +.621834939'+ 0 +.490771'- 1 +.522410'- 5 +.775328'- 5
+.899999999'+ 0 +.656100001'+ 0 +.119881'- 1 +.211100'- 7 +.198535'- 5
+.899999999'+ 0 +.656100001'+ 0
+.911988111'+ 0 +.691762013'+ 0 +.499094'- 1 +.204891'- 7 +.202310'- 5
+.961897514'+ 0 +.856081695'+ 0 +.513341'- 1 +.620633'- 5 +.926359'- 5
+.999999999'+ 0 +.100000000'+ 1 +.381025'- 1 +.210727'- 5 +.762050'- 5
+.999999999'+ 0 +.100000000'+ 1
END ØF JØB


GØ AHEAD
0110          'REAL'Y1,TØL,H0;
0140    DØ:'BEGIN''IF'X0+H>=B'THEN'
01450←
0145              'BEGIN'LASRØT:='TRUE'; H0:=H; H:=B-X0'END';
0265
LIS 0260
0260        'IF''NØT'LAST'THEN'H:=0.9*H*(TØL/ABS
ESCAPED!
0265                          'ELSE'H:=H0
```

$y = \frac{1}{1+x^2}$ zonder h gered.

```
LOCAL ED.
0060    F:=-2*X*Y↑2;
RUN
WAIT
0,1,1,'-3,'-3,0,

  X                    Y

          0       +.100000000'+ 1
          0       +.100000000'+ 1 +.115408'+ 0 +.661987'+ 0 +.139583'- 2
+.115408327'+ 0 +.986855782'+ 0 +.115968'+ 0 +.164752'- 3 +.229300'- 3
+.231376181'+ 0 +.949184668'+ 0 +.135625'+ 0 +.103018'- 3 +.226043'- 3
+.367001066'+ 0 +.881296012'+ 0 +.285159'+ 0 +.200116'- 4 +.255151'- 3
+.367001066'+ 0 +.881296012'+ 0 +.144786'+ 0 +.270237'- 2 +.485216'- 3
+.511786806'+ 0 +.792436823'+ 0 +.159811'+ 0 +.140686'- 3 +.259519'- 3
+.511786806'+ 0 +.792436823'+ 0 +.142809'+ 0 +.275779'- 3 +.269947'- 3
+.654595876'+ 0 +.700035314'+ 0 +.143067'+ 0 +.176031'- 3 +.242780'- 3
+.797663123'+ 0 +.611147586'+ 0 +.149001'+ 0 +.148751'- 3 +.230502'- 3
+.946663753'+ 0 +.527380730'+ 0 +.167024'+ 0 +.117784'- 3 +.227581'- 3
+.100000000'+ 1 +.500002247'+ 0 +.533362'- 1 +.121289'- 5 +.800045'- 4
+.100000000'+ 1 +.500002247'+ 0
+.105333624'+ 1 +.474044138'+ 0 +.209488'+ 0 +.945913'- 6 +.786200'- 4
+.126232409'+ 1 +.385408840'+ 0 +.226110'+ 0 +.168260'- 3 +.290226'- 3
+.148893412'+ 1 +.310873234'+ 0 +.304798'+ 0 +.882130'- 4 +.296402'- 3
 .179373179'+ 1 +.237142904'+ 0 +.383186'+ 0 +.138345'- 3 +.377078'- 3
+.199999999'+ 1 +.200026172'+ 0 +.206268'+ 0 +.676109'- 5 +.247527'- 3
+.199999999'+ 1 +.200026172'+ 0
+.220626821'+ 1 +.170447037'+ 0 +.562116'+ 0 +.869622'- 5 +.241426'- 3
+.276838417'+ 1 +.115498764'+ 0 +.539355'+ 0 +.517460'- 3 +.627040'- 3
+.300000000'+ 1 +.100058916'+ 0 +.231616'+ 0 +.646206'- 5 +.254791'- 3
+.300000000'+ 1 +.100058916'+ 0
+.323161583'+ 1 +.874323013'- 1 +.775302'+ 0 +.489542'- 5 +.251867'- 3
+.399999999'+ 1 +.588804761'- 1 +.768384'+ 0 +.250676'- 3 +.813627'- 3
+.399999999'+ 1 +.588804761'- 1
+.476838417'+ 1 +.421679910'- 1 +.229446'+ 1 +.219248'- 4 +.800785'- 3
+.500000000'+ 1 +.384953364'- 1 +.231616'+ 0 +.629768'- 6 +.240532'- 3
+.500000000'+ 1 +.384953364'- 1
+.523161583'+ 1 +.352771412'- 1 +.163617'+ 1 +.495871'- 6 +.239787'- 3
+.600000000'+ 1 +.270460249'- 1 +.768384'+ 0 +.990155'- 5 +.789166'- 3
+.600000000'+ 1 +.270460249'- 1
+.676838417'+ 1 +.213753424'- 1 +.324376'+ 1 +.760464'- 5 +.784809'- 3
+.700000000'+ 1 +.200112670'- 1 +.231616'+ 0 +.100496'- 6 +.236251'- 3
+.700000000'+ 1 +.200112670'- 1
 .723161583'+ 1 +.187729572'- 1 +.294519'+ 1 +.836638'- 7 +.235964'- 3
+.799999999'+ 1 +.153915827'- 1 +.768384'+ 0 +.385944'- 5 +.780211'- 3
+.799999999'+ 1 +.153915827'- 1
+.876838416'+ 1 +.128445238'- 1 +.469571'+ 1 +.248587'- 5 +.778254'- 3
+.900000000'+ 1 +.121996406'- 1 +.231616'+ 0 +.239767'- 7 +.234441'- 3
+.900000000'+ 1 +.121996406'- 1
+.923161584'+ 1 +.116019567'- 1 +.468018'+ 1 +.207025'- 7 +.234303'- 3
+.100000000'+ 2 +.990402966'- 2 +.768384'+ 0 +.126488'- 5 +.775994'- 3
+.100000000'+ 2 +.990402966'- 2
END ØF JØB
```

met h. gereed op het einde
van de procedure

```
LIS
0010'BEGIN''REAL'X,Y,X0,Y0,D,AE,RE,H;
0020    'INTEGER'I;
0030    'BØØLEAN'ØUTPUT;
0040    'REAL''PRØCEDURE' F(X,Y);
0050    'VALUE'X,Y;'REAL'X,Y;
0060    F:=-2*X*Y↑2;
0070
0080    'PRØCEDURE'RUNGE KUTTA(X,Y,FXY,X0,Y0,D,AE,RE,H);
0090    'VALUE'D,AE,RE; 'REAL'X,Y,FXY,X0,Y0,D,AE,RE,H;
0100    'BEGIN''REAL'B,K0,K1,K2,K3,K4,ABSR;
0110           'REAL'Y1,TØL,H0;
0120           'BØØLEAN'LAST;
0130       LAST:='FALSE'; B:=X0+D;
0140    DØ:'BEGIN''IF'X0+H>=B'THEN'
0150                'BEGIN'LAST:='TRUE'; H0:=H; H:=B-X0'END';
0160          X:=X0; Y:=Y0; K0:=H*FXY;
0170          X:=X0+0.5*H; Y:=Y0+0.5*K0; K1:=H*FXY;
0180                       Y:=Y0+0.5*K1; K2:=H*FXY;
0190          X:=X0+H;     Y:=Y0+K2;      K3:=H*FXY;
0200          X:=X0+.75*H;
0210          Y:=Y0+(5*K0+7*K1+13*K2-K3)/32; K4:=H*FXY;
0220          Y1:=Y0+(K0+2*(K1+K2)+K3)/6;
0230          ABSR:=ABS(2*(-K0+3*(K1+K2+K3)-8*K4)/3);
0240          TØL:=H*(AE+RE*ABS(Y1));
0250          'IF'ABSR<TØL
0260          'THEN''BEGIN'X0:=X0+H;Y0:=Y1'END'
0270          'ELSE'LAST:='FALSE';
0280          'IF''NØT'LAST'THEN'H:=0.9*H*(TØL/ABSR)↑(1/3)
0290                       'ELSE'H:=H0
0300       'END';
0310       'IF'ØUTPUT'THEN'
0320       'BEGIN'NLCR; FLØT(9,2,X0); FLØT(9,2,Y0);
0330          FLØT(6,2,H); FLØT(6,2,ABSR); FLØT(6,2,TØL)
0340       'END';
0350    UNTIL:'IF''NØT'LAST'THEN''GØTØ'DØ
0360    'END'RUNGE KUTTA;
0370
0380    X0:=READ; Y0:=READ; D:=READ;
0390    H:=D;
0400    AE:=READ; RE:=READ;
0410    ØUTPUT:=READ=0;
0420    NLCR; PRINTTEXT('('  X')'); SPACE(19); PRINTTEXT('('Y')');
0430    NLCR;
0440    NLCR; FLØT(9,2,X0); FLØT(9,2,Y0);
0450    'FØR'I:=1'STEP'1'UNTIL'10'DØ'
0460    'BEGIN'RUNGE KUTTA(X,Y,F(X,Y),X0,Y0,D,AE,RE,H);
0470       NLCR; FLØT(9,2,X0); FLØT(9,2,Y0)
0480    'END'
0490'END'

GØ AHEAD
STØ S

GØ AHEAD
BYE
PRØCESSTIME 01 MIN  12 SEC
CØNNECTIØNTIME  01 HR 45 MIN
LEFT AT 11 HR 14
```

$y = \frac{1}{1+x^2}$ mit h gerad

```
GO AHEAD
0060    F:=-2*X*Y↑2;
RUN
WAIT
0, 1, 1, '-3, '-3, 0,

  X                    Y

            0       +.100000000'+ 1
            0       +.100000000'+ 1 +.115408'+ 0 +.661937'+ 0 +.139583'- 2
+.115408327'+ 0 +.986855782'+ 0 +.115968'+ 0 +.164752'- 3 +.229300'- 3
+.231376181'+ 0 +.949184668'+ 0 +.135625'+ 0 +.103018'- 3 +.226043'- 3
+.367001066'+ 0 +.881296012'+ 0 +.285159'+ 0 +.200116'- 4 +.255151'- 3
+.367001066'+ 0 +.881296012'+ 0 +.144786'+ 0 +.270237'- 2 +.485216'- 3
+.511786806'+ 0 +.792436823'+ 0 +.159811'+ 0 +.140636'- 3 +.259519'- 3
+.511786806'+ 0 +.792436823'+ 0 +.142809'+ 0 +.275779'- 3 +.269947'- 3
+.654595876'+ 0 +.700035314'+ 0 +.143067'+ 0 +.176031'- 3 +.242780'- 3
+.797663123'+ 0 +.611147586'+ 0 +.149001'+ 0 +.148751'- 3 +.230502'- 3
+.946663753'+ 0 +.527380730'+ 0 +.167024'+ 0 +.117784'- 3 +.227581'- 3
+.100000000'+ 1 +.500002247'+ 0 +.167024'+ 0 +.121289'- 5 +.800045'- 4
+.100000000'+ 1 +.500002247'+ 0
+.116702437'+ 1 +.423384993'+ 0 +.211960'+ 0 +.848019'- 4 +.237740'- 3
+.137398472'+ 1 +.344649370'+ 0 +.265474'+ 0 +.105752'- 3 +.285012'- 3
+.164445860'+ 1 +.269984462'+ 0 +.347993'+ 0 +.109119'- 3 +.337148'- 3
 .199245156'+ 1 +.201256585'+ 0 +.437195'+ 0 +.153680'- 3 +.418029'- 3
+.199999999'+ 1 +.200043279'+ 0 +.437195'+ 0 +.291038'-10 +.905844'- 5
+.199999999'+ 1 +.200043279'+ 0
+.243719544'+ 1 +.144153410'+ 0 +.562666'+ 0 +.171065'- 3 +.500219'- 3
+.299986157'+ 1 +.100080042'+ 0 +.692618'+ 0 +.241921'- 3 +.618978'- 3
+.300000000'+ 1 +.100071723'+ 0 +.692618'+ 0 +.757912'-13 +.152289'- 6
+.300000000'+ 1 +.100071723'+ 0
+.369261831'+ 1 +.683962714'- 1 +.945788'+ 0 +.211863'- 3 +.739991'- 3
+.400000000'+ 1 +.588748918'- 1 +.945788'+ 0 +.529100'- 5 +.325479'- 3
+.400000000'+ 1 +.588748918'- 1
+.494578769'+ 1 +.393254107'- 1 +.147154'+ 1 +.190256'- 3 +.982981'- 3
+.500000000'+ 1 +.385088825'- 1 +.147154'+ 1 +.206637'- 8 +.563000'- 4
+.500000000'+ 1 +.385088825'- 1
+.600000000'+ 1 +.270598685'- 1 +.147154'+ 1 +.284610'- 4 +.102706'- 2
+.600000000'+ 1 +.270598685'- 1
+.700000000'+ 1 +.200211745'- 1 +.147154'+ 1 +.429130'- 5 +.102002'- 2
+.700000000'+ 1 +.200211745'- 1
+.800000000'+ 1 +.153983724'- 1 +.147154'+ 1 +.623420'- 5 +.101540'- 2
+.800000000'+ 1 +.153983724'- 1
 .900000000'+ 1 +.122042924'- 1 +.147154'+ 1 +.447087'- 5 +.101220'- 2
+.900000000'+ 1 +.122042924'- 1
+.100000000'+ 2 +.990728108'- 2 +.147154'+ 1 +.288877'- 5 +.100991'- 2
+.100000000'+ 2 +.990728108'- 2
END ØF JØB
```

```
RUN
WAIT
0,0,0,0.1,←
0,0,0.1,'-4,'-4,0,
```

$y = x^Y$ met h geval

```
  X                    Y

          0                   0
          0                   0      +.417757'- 1 +.100000'- 3 +.100010'- 4
+.417756917'- 1 +.304575241'- 5 +.417743'- 1 +.304575'- 5 +.417758'- 5
+.835500339'- 1 +.487288904'- 4 +.417750'- 1 +.304536'- 5 +.417764'- 5
+.100000000'+ 0 +.999999999'- 4 +.417750'- 1 +.732252'- 7 +.164516'- 5
+.100000000'+ 0 +.999999999'- 4
+.141774978'+ 0 +.404015814'- 3 +.417799'- 1 +.304555'- 5 +.417919'- 5
+.183554896'+ 0 +.113517781'- 2 +.417900'- 1 +.304700'- 5 +.418273'- 5
+.200000000'+ 0 +.160000000'- 2 +.417900'- 1 +.731379'- 7 +.164714'- 5
+.200000000'+ 0 +.160000000'- 2
+.241790026'+ 0 +.341785415'- 2 +.418218'- 1 +.304995'- 5 +.419329'- 5
+.283611815'+ 0 +.646989565'- 2 +.418642'- 1 +.305922'- 5 +.420924'- 5
+.300000000'+ 0 +.810000004'- 2 +.418642'- 1 +.721290'- 7 +.165209'- 5
+.300000000'+ 0 +.810000004'- 2
+.341864188'+ 0 +.136588595'- 1 +.419636'- 1 +.307166'- 5 +.424360'- 5
+.383827760'+ 0 +.217042871'- 1 +.420747'- 1 +.310084'- 5 +.428744'- 5
+.400000000'+ 0 +.256000002'- 1 +.420747'- 1 +.683746'- 7 +.165862'- 5
+.400000000'+ 0 +.256000002'- 1
+.442074709'+ 0 +.381929041'- 1 +.422988'- 1 +.313406'- 5 +.436817'- 5
+.484373484'+ 0 +.550454523'- 1 +.425261'- 1 +.320142'- 5 +.446271'- 5
+.500000001'+ 0 +.625000005'- 1 +.425261'- 1 +.596046'- 7 +.166032'- 5
+.500000001'+ 0 +.625000005'- 1
+.542526111'+ 0 +.866328464'- 1 +.429477'- 1 +.327049'- 5 +.462103'- 5
+.585473809'+ 0 +.117497841'+ 0 +.433479'- 1 +.340274'- 5 +.479940'- 5
+.600000001'+ 0 +.129600000'+ 0 +.433479'- 1 +.446259'- 7 +.164088'- 5
+.600000001'+ 0 +.129600000'+ 0
+.643347917'+ 0 +.171310347'+ 0 +.440345'- 1 +.353095'- 5 +.507739'- 5
+.687382453'+ 0 +.223251182'+ 0 +.446760'- 1 +.376006'- 5 +.538653'- 5
+.700000000'+ 0 +.240100001'+ 0 +.446760'- 1 +.254562'- 7 +.156470'- 5
+.700000000'+ 0 +.240100001'+ 0
+.744675977'+ 0 +.307517176'+ 0 +.456831'- 1 +.398296'- 5 +.584146'- 5
+.790359040'+ 0 +.390209376'+ 0 +.466227'- 1 +.435549'- 5 +.635090'- 5
+.800000000'+ 0 +.409600000'+ 0 +.466227'- 1 +.853712'- 8 +.135899'- 5
+.800000000'+ 0 +.409600000'+ 0
+.846622691'+ 0 +.513759207'+ 0 +.479653'- 1 +.472491'- 5 +.705755'- 5
+.894587943'+ 0 +.640460225'+ 0 +.492739'- 1 +.529115'- 5 +.786851'- 5
+.899999999'+ 0 +.656099998'+ 0 +.492739'- 1 +.108654'- 8 +.896291'- 6
+.899999999'+ 0 +.656099998'+ 0
+.949273859'+ 0 +.812018803'+ 0 +.509255'- 1 +.589589'- 5 +.892852'- 5
+.999999999'+ 0 +.999999995'+ 0 +.509255'- 1 +.662108'- 5 +.101452'- 4
+.999999999'+ 0 +.999999995'+ 0
END ØF JØB

GØ AHEAD
0060    F:=-2*X*Y↑2
RUN
WAIT
0080ER LEFTPRT11
0090DECLARATIØ07
0090DBLE NAME 23
```