Numerieke Methodes in de Algebra

Prof. Dr. Guido Vanden Berghe

Chapter 5

Veelterminterpolatie

Doelstelling

De studie van de interpolatietheorie gebeurt meestal in functie van de verdere toepassingen ervan in het numeriek rekenen. Numerieke methoden voor het berekenen van afgeleiden, het bepalen van waarden van bepaalde integralen, het integreren van differentiaalvergelijkingen, zijn doorgaans gebaseerd op interpolatie technieken. In dit hoofdstuk behandelen we de veelterminterpolatie, waarbij de belangrijkste formules (Lagrange, Newton, Gauss, Hermite, ...) aan bod komen. Veel aandacht zal besteed worden aan het gebruik van differentieoperatoren (voorwaartse, achterwaartse en centrale vormen). In een laatste paragraaf wordt het begrip "spline" gedefinieerd en aan de hand van de kubische spline geïllustreerd.

Het concept van interpolatie bestaat in het selecteren van een functie $p(x)$ uit een gegeven klasse functies op zulke wijze dat de grafiek $y = p(x)$ loopt door de gegeven punten (x_i, y_i), $i = 1, 2, \ldots, n$. In dit hoofdstuk zullen we ons vooral beperken tot interpolatiefuncties $p(x)$ van het veeltermtype.

De veelterminterpolatietheorie heeft verschillende belangrijke toepassingen. In de eerste instantie zullen we wiskundige werktuigen opbouwen die bruikbaar zijn in approximatietheorie, in numerieke afleiding en integratie en in de numerieke oplossing van differentiaalvergelijkingen. In tweede instantie worden aldus middelen ontwikkeld om te werken met functies die aangebracht worden in tabelvorm. We denken aan het gebruik van lineaire interpolatie in logaritme, sinus, ... etc. tabellen, zoals dit vroeger frequent gebeurde.

5.1 De Lagrange interpolatieformule

Laat $x_0, x_1, \ldots, x_n$ onderling verschillende reële of complexe getallen zijn, en $y_0, y_1, \ldots, y_n$ de corresponderende functiewaarden. We wensen een veelterm $p(x)$ te construeren die in de $(n+1)$ gegeven abscispunten de gegeven functiewaarden aanneemt, i.e.

$$p(x_i) = y_i \quad , \qquad i = 0, 1, \ldots, n \; . \tag{5.1}$$

Bestaat dergelijke veelterm en zo ja, wat is zijn graad ? Is die veelterm uniek ? Hoe ziet deze veelterm eruit in termen van de gegeven (x_i, y_i)–waarden ?

Door voorop te stellen dat

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m$$

introduceren we $(m+1)$ onafhankelijke parameters $a_0, a_1, \ldots, a_m$. Vermits (5.1)$(n+1)$ voorwaarden oplegt aan $p(x)$ ligt het voor de hand $m = n$ te kiezen. We wensen $a_0,\, a_1, \ldots,\, a_n$ zo te vinden dat

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \ldots + a_n x_0^n = y_0 \\ \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \ldots + a_n x_n^n = y_n \end{cases} \tag{5.2}$$

Dit is een stelsel van $(n+1)$ lineaire vergelijkingen in $(n+1)$ onbekenden en dit stelsel oplossen is compleet equivalent met het oplossen van het veelterminterpolatie probleem. In vector en matrix notatie leest het stelsel (5.2)

$$Xa = y$$

met

$$\begin{aligned} X &= [x_i^j] \; , & i, j &= 0, 1, \ldots, n \\ a &= [a_0,\, a_1, \ldots,\, a_n]^T \; , & y &= [y_0, \ldots,\, y_n]^T \; . \end{aligned}$$

De matrix X staat bekend als een zgn. Vandermonde matrix.
Vermits $\det(X) = \prod\limits_{0 \le j < i \le n} (x_i - x_j) \neq 0$ daar alle x_i onderling verschillend zijn, bezit het stelsel $Xa = y$ een unieke oplossing a.

De interpolatieveelterm kan nu expliciet opgebouwd worden. Om te beginnen, beschouwen we het bijzondere interpolatieprobleem waarbij

$$y_i = 1 \quad \text{en} \quad y_j = 0 \quad \text{voor} \quad j \neq i$$

voor een bepaalde $i,\ 0 \le i \le n$. We wensen dus een veelterm $l_i(x)$ te construeren van graad n (er zijn immers n verschillende wortels) en met n punten $x_j,\ j \neq i$ als wortels, d.i.

$$l_i(x) = c(x - x_0) \ldots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \ldots (x - x_n)$$

met c een bepaalde constante. De voorwaarde $l_i(x_i) = 1$ leidt tot

$$c = [(x_i - x_0) \ldots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \ldots (x_i - x_n)]^{-1} .$$

Deze bijzondere polynoom is dus neerschrijfbaar als

$$l_i(x) = \prod_{j \neq i} \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) , \qquad (i = 0, 1, \ldots, n) . \tag{5.3}$$

Om nu het algemeen interpolatieprobleem (5.1) op te lossen schrijf

$$p(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + \ldots + y_n l_n(x) .$$

Met de speciale eigenschappen die de veeltermen $l_i(x)$ bezitten, voldoet $p(x)$ automatisch aan (5.1). De graad van $p(x)$ is kleiner dan of gelijk aan n vermits alle $l_i(x)$ van graad n zijn. Om de enigheid van $p(x)$ te bewijzen, vertrekken we van een andere veelterm $q(x)$ van graad kleiner dan of gelijk aan n die eveneens aan (5.1) voldoet. Beschouw

$$r(x) = p(x) - q(x)$$

dan is (graad $r(x)) \leq n$ en

$$r(x_i) = p(x_i) - q(x_i) = y_i - y_i = 0 , \qquad (i = 0, 1, \ldots, n) .$$

Vermits $r(x)$ $(n + 1)$ wortels bezit, moet $r(x) \equiv 0$. Dit bewijst dat $p(x) \equiv q(x)$. De enigheid van de oplossing zal van praktisch nut blijken te zijn voor wat volgt. We zullen namelijk andere formules afleiden die voldoen aan (5.1) en de enigheid wijst er dan op dat het in feite alle dezelfde veeltermen zijn.
De formule

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x) \tag{5.4}$$

wordt de Lagrange vorm van de interpolatieveelterm genoemd.

Steunend op voorgaande afleidingen kunnen we volgend theorema formuleren :

Theorema 5.1.1

Als x_0, $x_1, \ldots,$ x_n reële verschillende getallen zijn, dan bestaat er voor willekeurige waarden y_0, $y_1, \ldots,$ y_n een unieke veelterm $p_n(x)$ van graad ten hoogste n zodat

$$p_n(x_i) = y_i , \qquad (0 \leq i \leq n) .$$

Voorbeeld 5.1.1

De veelterm van graad kleiner dan of gelijk aan 2 die in overeenstemming is met de gegevens (0,1), $(-1, 2)$ en (1,3), wordt gegeven door

$$\begin{aligned} p_2(x) &= \frac{(x+1)(x-1)}{(0+1)(0-1)} \cdot 1 + \frac{(x-0)(x-1)}{(-1-0)(-1-1)} \cdot 2 + \frac{(x-0)(x+1)}{(1-0)(1+1)} \cdot 3 \\ &= 1 + \frac{1}{2}x + \frac{3}{2}x^2 . \end{aligned}$$

◇

Theorema 5.1.2

(Theorema omtrent de nauwkeurigheid van de Lagrange interpolatieformule.)

Een functie $f(x)$ kan benaderd worden d.m.v. een interpolatieveelterm. Weze $x_0, x_1, \ldots, x_n$ verschillende reële getallen en weze f een gegeven reële functie met $n+1$ continue afgeleiden in het interval $I_t = \mathcal{H}(t, x_0, x_1, \ldots, x_n)$ met t een gegeven reëel getal ($\mathcal{H}(a, b, c \ldots)$ is het kleinste interval dat alle reële getallen $a, b, c \ldots$ bevat). Benadert men de functie $f(x)$ d.m.v. de interpolatieveelterm

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) , \tag{5.5}$$

dan bestaat er een $\xi \in I_t$ zodat

$$f(t) - \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j(t) = \frac{(t-x_0)\ldots(t-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) . \tag{5.6}$$

Bewijs

Noteer vooreerst dat dit resultaat triviaal waar is als $t \in \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ omdat dan beide leden van (5.6) nul worden. Veronderstel vanaf nu dat $t \notin \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$. Definieer dan

$$\begin{aligned} E(x) &= f(x) - p_n(x) \qquad \text{en} \qquad p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j(x) \\ G(x) &= E(x) - \frac{\Psi(x)}{\Psi(t)} E(t) \qquad \text{voor alle } x \in I_t \end{aligned}$$

met $\Psi(x) = (x - x_0)\ldots(x - x_n)$.
De functie $G(x)$ is $(n+1)$ maal continu afleidbaar in I_t, evenals $E(x)$ en $\Psi(x)$. Tevens is

$$\begin{aligned} G(x_i) &= E(x_i) - \frac{\Psi(x_i)}{\Psi(t)} E(t) = 0 , \qquad i = 0, 1, \ldots, n \\ G(t) &= E(t) - E(t) = 0 . \end{aligned}$$

Dus G bezit $(n+2)$ verschillende wortels in I_t, d.w.z. volgens het veralgemeend Rolle theorema bestaat er een $\xi = \xi(x)$ in I_t waarvoor $G^{(n+1)}(\xi) = 0$.
Vermits

$$\begin{aligned} E^{(n+1)}(x) &= f^{(n+1)}(x) \\ \Psi^{(n+1)}(x) &= (n+1)! \end{aligned}$$

bekomen we

$$G^{(n+1)}(x) = f^{(n+1)}(x) - \frac{(n+1)!}{\Psi(t)}\, E(t)\,.$$

Substitueer hierin $x = \xi$ en los op naar $E(t)$:

$$E(t) = \frac{\Psi(t)}{(n+1)!}\, f^{(n+1)}(\xi)\,,$$

wat het te bewijzen resultaat is. $\diamond$

Opmerking 5.1.1

De polynoom $l_i(x)$ (5.3) kan beknopter genoteerd worden.
Definieer

$$\Psi(x) = (x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n) \tag{5.7}$$

dan is

$$\Psi'(x_k) = (x_k-x_0)(x_k-x_1)\ldots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\ldots(x_k-x_n) \tag{5.8}$$

met $\Psi'(x) = d\Psi/dx$.
Dit levert dan

$$l_i(x) = \frac{\Psi(x)}{\Psi'(x_i)(x-x_i)}$$

terwijl (5.4) dan wordt

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{\Psi(x)}{\Psi'(x_i)(x-x_i)}\, y_i\,. \tag{5.9}$$

Opmerking 5.1.2

Wanneer de verschillende gegeven abscispunten equidistant liggen, d.w.z.

$$(x_1-x_0) = (x_2-x_1) = \ldots = (x_n-x_{n-1}) = \Delta x \neq 0$$

dan kunnen we $x = x_0 + s\Delta x$ en $x_i = x_0 + i\Delta x$ stellen.
Dan kan (5.9) genoteerd worden als

$$\begin{aligned} p_n(x) &= p_n(x_0 + s\Delta x) \\ &= \sum_{i=0}^{n} \frac{s(s-1)\dots(s-i+1)(s-i-1)\dots(s-n)}{i(i-1)\dots1(-1)\dots(i-n)} y_i \\ &= s(s-1)\dots(s-n)\sum_{i=0}^{n} \frac{y_i(-1)^{n-i}}{i!\,(n-i)!\,(s-i)} \end{aligned}$$

of ook nog

$$p_n(x) = \frac{(-1)^n s(s-1)\dots(s-n)}{n!} \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \binom{n}{i} \frac{y_i}{s-i}\,. \tag{5.10}$$

5.2 De Newton interpolatieformule

5.2.1 Formules met differentiequotiënten

De Lagrange interpolatieveelterm kan aangewend worden voor de interpolatie van een functie gegeven in tabelvorm. Er zijn echter vormen die geschikter zijn en deze worden in deze paragraaf ontwikkeld. Met de Lagrange formule is het moeilijk over te stappen van een interpolatieveelterm van een bepaalde graad n naar een andere van graad $n+1$. Een vergelijking opgebouwd met interpolatieveeltermen van verschillende graad kan interessant zijn om uiteindelijk te beslissen welke de meest geschikte veelterm is. In feite wensen we te schrijven

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + C(x)\,, \tag{5.11}$$

met $\{x_0, \dots, x_{n-1}\}$ de abscispunten voor $p_{n-1}(x)$ en $\{x_0, \dots, x_n\}$ de abscispunten voor $p_n(x)$. In 't algemeen is $C(x)$ een veelterm van graad n. Nu is ook

$$C(x_i) = p_n(x_i) - p_{n-1}(x_i) = f(x_i) - f(x_i) = 0\,, \quad i = 0, 1, \dots, n-1\,.$$

Dus

$$C(x) = a_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})\,.$$

Vermits $p_n(x_n) = f(x_n)$ hebben we uiteindelijk

$$a_n = \frac{f(x_n) - p_{n-1}(x_n)}{(x_n - x_0)\dots(x_n - x_{n-1})}\,.$$

Zulke a_n wordt de n^{de} orde Newton differentiequotiënt van f genoemd en wordt genoteerd als

$$a_n \equiv f[x_0,\, x_1,\, \ldots,\, x_n]$$

en de interpolatieformule is dan te schrijven als

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + (x - x_0)\ldots(x - x_{n-1}) f[x_0, \ldots, x_n]\,. \tag{5.12}$$

We kunnen meer informatie over a_n inwinnen door te steunen op de Lagrange vorm (5.9) van p_n toegepast op de functie $f(x)$, nl.

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{\Psi(x)}{(x - x_j)\Psi'(x_j)}\, f(x_j)\,. \tag{5.13}$$

Vermits a_n de coëfficiënt van x^n in $p_n(x)$ is, kunnen we hieruit afleiden dat

$$f[x_0,\, x_1, \ldots,\, x_n] = \sum_{j=0}^{n} \frac{f(x_j)}{\Psi'(x_j)}\,. \tag{5.14}$$

Uit deze formule volgt een belangrijke eigenschap van deze differentiequotiënten. Weze $(\pi_0,\, \pi_1, \ldots,\, \pi_n)$ een bepaalde permutatie van $(0, 1, \ldots, n)$ dan is

$$\sum_{j=0}^{n} \frac{f(x_j)}{\Psi'(x_j)} = \sum_{j=0}^{n} \frac{f(x_{\pi_j})}{\Psi'(x_{\pi_j})}$$

vermits de tweede som eigenlijk een herschikking is van de eerste, d.w.z.

$$f[x_0,\, x_1, \ldots,\, x_n] = f[x_{\pi_0},\, x_{\pi_1}, \ldots, x_{\pi_n}]$$

voor elke permutatie $(\pi_0, \ldots, \pi_n)$ van $(0, 1, \ldots, n)$. Een tweede bruikbare formule wordt geformuleerd in het volgend theorema :

Theorema 5.2.1

Differentiequotiënten voldoen aan de relatie

$$f[x_0,\, x_1, \ldots,\, x_n] = \frac{f[x_1, \ldots,\, x_n] - f[x_0, \ldots,\, x_{n-1}]}{(x_n - x_0)}\,. \tag{5.15}$$

Bewijs

De coëfficiënt van elke $f(x_i)$ in (5.15) $(i = 1, 2, \ldots, n-1)$ in het rechterlid luidt

$$\frac{1}{x_n - x_0}\left[\frac{1}{(x_i - x_1)\ldots(x_i - x_n)} - \frac{1}{(x_i - x_0)\ldots(x_i - x_{n-1})}\right]$$

waarbij uiteraard in elke noemer de factor $(x_i - x_i)$ ontbreekt. Deze coëfficiënt reduceert tot

$$\frac{1}{(x_i - x_0)\dots(x_i - x_n)} = \frac{1}{\Psi'(x_i)}\,.$$

Voor $i = 0$ en $i = n$ komt de coëfficiënt van $f(x_i)$ slechts in één van de twee termen in het rechterlid van (5.15) voor, nl. als

$$\begin{aligned} -\frac{f(x_0)}{(x_n - x_0)(x_0 - x_1)\dots(x_0 - x_{n-1})} &= \frac{f(x_0)}{\Psi'(x_0)} \qquad \text{en} \\ \frac{f(x_n)}{(x_n - x_0)(x_n - x_1)\dots(x_n - x_{n-1})} &= \frac{f(x_n)}{\Psi'(x_n)}\,. \end{aligned}$$

Alle termen samennemend leidt tot de uitdrukking (5.14) van $f[x_0,\, x_1, \dots,\, x_n]$. ◇

Uit (5.12) volgen de formules

$$\begin{aligned} p_0(x) &= f(x_0) \\ p_1(x) &= f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] \\ &\vdots \\ p_n(x) &= f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] + \dots \\ &\quad +(x - x_0)\dots(x - x_{n-1})f[x_0, x_1, \dots, x_n]\,. \end{aligned} \tag{5.16}$$

Dit zijn de Newton differentiequotiënt formules voor de interpolatieveelterm. Om de differentiequotiënten te construeren maakt men best gebruik van een tabel (zie tabel 1).

x	$f(x)$	eerste orde differentie quotiënt	tweede orde differentie quotiënt	derde orde differentie quotiënt
x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1]-f[x_0]}{x_1-x_0}$		
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}$	
		$f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2]-f[x_1]}{x_2-x_1}$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_1,x_2,x_3]-f[x_0,x_1,x_2]}{x_3-x_0}$
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_2,x_3]-f[x_1,x_2]}{x_3-x_1}$	
		$f[x_2, x_3] = \frac{f[x_3]-f[x_2]}{x_3-x_2}$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_2,x_3,x_4]-f[x_1,x_2,x_3]}{x_4-x_1}$
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_3,x_4]-f[x_2,x_3]}{x_4-x_2}$	
		$f[x_3, x_4] = \frac{f[x_4]-f[x_3]}{x_4-x_3}$		$f[x_2, x_3, x_4, x_5] = \frac{f[x_3,x_4,x_5]-f[x_2,x_3,x_4]}{x_5-x_2}$
x_4	$f[x_4]$		$f[x_3, x_4, x_5] = \frac{f[x_4,x_5]-f[x_3,x_4]}{x_5-x_3}$	
		$f[x_4, x_5] = \frac{f[x_5]-f[x_4]}{x_5-x_4}$		
x_5	$f[x_5]$			

tabel 1

Uiteraard kan de foutterm (5.6) ook geherformuleerd worden met differentiequotiënten. Weze t een reëel getal verschillend van $x_0, x_1, \ldots, x_n$ dan luidt de interpolatieveelterm voor de abscispunten $x_0, \ldots, x_n$ en t in Newton vorm :

$$\begin{aligned}
p_{n+1}(x) &= f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] + \ldots \\
&\quad +(x - x_0)\ldots(x - x_{n-1})f[x_0, \ldots, x_n] + \\
&\quad +(x - x_0)\ldots(x - x_n)f[x_0, x_1, \ldots, x_n, t] \\
&= p_n(x) + (x - x_0)\ldots(x - x_n)f[x_0, x_1, \ldots, x_n, t]\,.
\end{aligned}$$

Vermits $p_{n+1}(t) = f(t)$ leiden we hieruit af dat

$$f(t) = p_n(t) + (t - x_0)\ldots(t - x_n)f[x_0, x_1, \ldots, x_n, t]$$

en dit levert ons een andere formule voor de fout $f(t) - p_n(t)$. Als we deze formule vergelijken met (5.6) volgt hieruit (onder dezelfde continuïteitsvoorwaarden)

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n, t] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \tag{5.17}$$

met $\xi \in \mathcal{H}(x_0, x_1, \ldots, x_n, t)$. Om dit resultaat symmetrisch te maken in de argumenten, kunnen we $t = x_{n+1}$, en $n = m - 1$ stellen om te bekomen

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_m] = \frac{f^{(m)}(\xi)}{m!} \quad \text{met} \quad \xi \in \mathcal{H}(x_0, \ldots, x_m)\,.$$

5.2.2 Eindige differenties en tabel georiënteerde Newton formules

Definieer voor een gegeven $h > 0$

$$\Delta_h f(z) = f(z + h) - f(z)\,.$$

Over het algemeen is de index h uit de context afleidbaar en dus overbodig zodat bovenstaande definitie te schrijven is als :

$$\Delta f(z) = f(z + h) - f(z)\,. \tag{5.18}$$

Dit wordt de voorwaartse differentie van f bij z genoemd en Δ is de voorwaartse differentieoperator. Van hier af aan zullen we verderwerken met equidistante abscispunten, nl. $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Aldus is (5.18) noteerbaar als

$$\Delta f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_i)$$

of nog

$$\Delta f_i = f_{i+1} - f_i \quad \text{met} \quad f(x_i) = f_i\,.$$

Voor $r > 0$ kunnen we de voorwaartse differentie van de r^{de} orde van f bij z definiëren als

$$\Delta^r f(z) = \Delta^{r-1} f(z+h) - \Delta^{r-1} f(z) = \Delta^{r-1}(\Delta f(z)) \tag{5.19}$$

met $\Delta^0 f(z) = f(z)$.

Lemma 5.2.1

Voor alle $k \geq 0$ is

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = \frac{1}{k!\, h^k} \Delta^k f_0 \, . \tag{5.20}$$

Bewijs

Voor $k = 0$ is het resultaat triviaal waar.
Voor $k = 1$:

$$f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \frac{\Delta f_0}{h}$$

wat in overeenstemming is met (5.20). Neem nu aan dat het resultaat (5.20) waar is voor alle voorwaartse differenties tot orde $k \leq r$. Dan volgt uit (5.15) voor $k = r + 1$

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_{r+1}] = \frac{f[x_1, \ldots, x_{r+1}] - f[x_0, \ldots, x_r]}{x_{r+1} - x_0}$$

wat door de inductiehypothese te schrijven is als :

$$\frac{1}{(r+1)h} \left(\frac{1}{r!\, h^r} \Delta^r f_1 - \frac{1}{r!\, h^r} \Delta^r f_0 \right) = \frac{1}{(r+1)!\, h^{r+1}} \Delta^{r+1} f_0 \, .$$

◇

We zullen nu de Newton interpolatieformule (5.16) omvormen tot een formule uitgedrukt in termen van voorwaartse differentie i.p.v. differentiequotiënten. Hiertoe definiëren we

$$\mu = \frac{x - x_0}{h}$$

om de ligging van x t.o.v. x_0 aan te duiden. We hebben een formule nodig voor

$$(x - x_0) \ldots (x - x_k)$$

uitgedrukt in termen van de veranderlijke μ. Vermits

$$x - x_j = x_0 + \mu h - (x_0 + jh) = (\mu - j)h$$

is

$$(x - x_0)\dots(x - x_k) = \mu(\mu - 1)\dots(\mu - k)h^{k+1}\,. \tag{5.21}$$

Door (5.21), (5.20) en (5.16) te combineren, krijgen we

$$p_n(x) = f_0 + \mu h\frac{\Delta f_0}{h} + \mu(\mu-1)h^2\frac{\Delta^2 f_0}{2!\,h^2} + \dots + \mu(\mu-1)\dots(\mu-n+1)h^n\frac{\Delta^n f_0}{n!\,h^n}$$

of

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n}\binom{\mu}{j}\Delta^j f_0 \quad , \quad \mu = \frac{x - x_0}{h}\,. \tag{5.22}$$

Dit is de Newton voorwaartse differentievorm van de interpolatieveelterm.
Voor $n = 1$ bekomt men de formule

$$p_1(x) = f_0 + \mu\Delta f_0\,,$$

die frequent gebruikt wordt om lineaire interpolatie te verrichten in een tabel.

Voor $n = 2$ is

$$p_2(x) = f_0 + \mu\Delta f_0 + \frac{\mu(\mu-1)}{2}\Delta^2 f_0$$

een gemakkelijk berekenbare vorm van de kwadratische interpolatieveelterm. De voorwaartse differenties worden berekend volgens een patroon dat gelijkt op dit van de differentiequotiënten (zie tabel 2)

Voorbeeld 5.2.1

De voorwaartse differenties voor $f(x) = \sqrt{x}$ zijn gegeven in tabel 3.

x_i	f_i	Δf_i	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_i$	$\Delta^4 f_i$
2.0	1.414214				
		0.034924			
2.1	1.449138		-0.000822		
		0.034102		.000055	
2.2	1.483240		-0.000767		-0.000005
		0.033335		.000050	
2.3	1.516575		-0.000717		
		0.032618			
2.4	1.549193				

tabel 3

$$
\begin{array}{cccccccc}
x_i & f_i & & \Delta f_i & & \Delta^2 f_i & & \Delta^3 f_i \\
x_0 & f_0 & & & & & & \\
 & & \searrow & & & & & \\
 & & & \Delta f_0 & & & & \\
 & & \nearrow & & \searrow & & & \\
x_1 & f_1 & & & & \Delta^2 f_0 & & \\
 & & \searrow & & \nearrow & & \searrow & \\
 & & & \Delta f_1 & & & & \Delta^3 f_0 \\
 & & \nearrow & & \searrow & & \nearrow & \\
x_2 & f_2 & & & & \Delta^2 f_1 & & \\
 & & \searrow & & \nearrow & & \searrow & \\
 & & & \Delta f_2 & & & & \Delta^3 f_1 \\
 & & \nearrow & & \searrow & & \nearrow & \\
x_3 & f_3 & & & & \Delta^2 f_2 & & \\
 & & \searrow & & \nearrow & & \searrow & \\
 & & & \Delta f_3 & & & & \Delta^3 f_2 \\
 & & \nearrow & & \searrow & & \nearrow & \\
x_4 & f_4 & & & & \Delta^2 f_3 & & \\
 & & \searrow & & \nearrow & & & \\
 & & & \Delta f_4 & & & & \\
 & & \nearrow & & & & & \\
x_5 & f_5 & & & & & & \\
\vdots & \vdots & & & & & &
\end{array}
$$

tabel 2

Bepalen we nu $p_n(x)$ d.m.v. (5.22) voor $n = 1, 2, 3, 4$ met $x = 2.15$. Noteer dat $\sqrt{2.15} = 1.4662878\ldots$ en $\mu = \dfrac{2.15 - 2}{0.1} = 1.5$

$$
\begin{aligned}
p_1(x) &= 1.414214 + (1.5)(0.034924) \\
&= 1.414214 + 0.052386 = 1.466600 \\
p_2(x) &= p_1(x) + \frac{(1.5)(0.5)}{2}(-0.000822) \\
&= 1.466600 - 0.000308 = 1.466292 \\
p_3(x) &= p_2(x) + \frac{(1.5)(0.5)(-0.5)}{6}(0.000055) \\
&= 1.466292 - 0.000003 = 1.466289 \\
p_4(x) &= p_3(x) + \frac{(1.5)(0.5)(-0.5)(-1.5)}{24}(-0.000005) \\
&= 1.466289 - 0.000000 = 1.466289\,.
\end{aligned}
$$

De correctietermen worden gemakkelijk berekend; hun grootte geeft meestal een goed idee over de exactheid van het resultaat. ◇

Als we de gegeven abscispunten herordenen als $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_0$ kan een formule opgesteld worden die sterk lijkt op (5.16), nl.

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f(x_n) + (x - x_n) f[x_{n-1}, x_n] + (x - x_n)(x - x_{n-1}) f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] \\ &\quad + \ldots + (x - x_n)(x - x_{n-1}) \ldots (x - x_1) f[x_0, x_1, \ldots, x_n] \,. \end{aligned}$$

Als we ook hier de equidistantie van de abscispunten veronderstellen, maar nu alle punten refereren t.o.v. x_n, m.a.w. $x = x_n + \nu h$, is bovenstaande betrekking te herschrijven als

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f(x_n) + \nu h f[x_{n-1}, x_n] + \nu(\nu+1) h^2 f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] + \ldots \\ &\quad + \nu(\nu+1)\ldots(\nu+n-1) h^n f[x_0, x_1, \ldots, x_n] \,. \end{aligned} \tag{5.23}$$

We kunnen ook de achterwaartse differentieoperator invoeren, nl.

$$\begin{array}{lll} & \nabla_h f(z) & = f(z) - f(z-h) \\ \text{of ook} & \nabla f(z) & = f(z) - f(z-h) \\ \text{of} & \nabla f(x_i) & = f(x_i) - f(x_{i-1}) \\ \text{of} & \nabla f_i & = f_i - f_{i-1} \,. \end{array} \tag{5.24}$$

Voor $r > 0$ wordt de achterwaartse differentie van de r^{de} orde van f bij z gedefinieerd als

$$\nabla^r f(z) = \nabla^{r-1}(\nabla f(z)) \,.$$

Lemma 5.2.2

Voor alle $k \geq 0$ is

$$f[x_{n-k}, \ldots, x_{n-1}, x_n] = \frac{1}{k!\, h^k} \nabla^k f(x_n) \,. \tag{5.25}$$

Bewijs : oefening. ◇

Door (5.25) te introduceren in (5.23) verkrijgen we :

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f(x_n) + \nu \nabla f(x_n) + \frac{\nu(\nu+1)}{2} \nabla^2 f(x_n) + \ldots \\ &\quad + \frac{\nu(\nu+1)\ldots(\nu+n-1)}{n!} \nabla^n f(x_n) \,. \end{aligned}$$

Per definitie is

$$\begin{aligned}\binom{-s}{k} &= \frac{-s(-s-1)\dots(-s-k+1)}{k!} \qquad \text{of} \\ \binom{-s}{k} &= (-1)^k\,\frac{s(s+1)\dots(s+k-1)}{k!}\end{aligned}$$

zodat $p_n(x)$ ook te schrijven is als

$$p_n(x) = f(x_n) - \binom{-\nu}{1}\nabla f(x_n) + \binom{-\nu}{2}\nabla^2 f(x_n) + \ldots + (-1)^n\binom{-\nu}{n}\nabla^n f(x_n)$$

of nog

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^k\binom{-\nu}{k}\nabla^k f(x_n)\,, \qquad \nu = \frac{x - x_n}{h} \tag{5.26}$$

Dit is de Newton achterwaartse differentievorm van de interpolatieveelterm. Opnieuw kan voor de bepaling van die achterwaartse differenties een tabel opgesteld worden. Doorgaans gaat men de voorwaartse vorm (5.22) bezigen voor interpolatie in de omgeving van x_0, nl. $x_0 < x < x_1$ terwijl de achterwaartse vorm (5.26) best gebruikt wordt voor interpolatie in de omgeving van x_n, nl. $x_{n-1} < x < x_n$.

De Newton formules zijn weinig geschikt om een benaderde waarde te bepalen in een punt x dat gesitueerd is in het centrum van de tabel. Hiertoe dienen interpolatieformules uitgedrukt te worden in termen van centrale differenties. Dit onderwerp valt buiten het kader van de huidige collegenota's

DEMO 7 (Maple)

Zie Claroline

5.3 Chebyshev veeltermen en foutenreductie

Bij het beheersen van de grootte van de fout bij interpolatie speelt de verzameling orthogonale veeltermen van Chebyshev $\{T_n\}$ een belangrijke rol. Zij kunnen op vele wijzen afgeleid worden; ze zijn gedefinieerd in het interval $[-1, 1]$ Hier zullen we de Chebyshev veeltermen rechtstreeks afleiden op basis van een definitie. In de cursus Numerieke Analyse, zullen we diezelfde veeltermen ontmoeten als een voorbeeld uit de brede klasse van orthogonale veeltermen.

Voor $x \in [-1, 1]$ definieer

$$T_n(x) = \cos[n\,\mathrm{bgcos}\;x] \qquad \text{voor elke } n \geq 0\,. \tag{5.27}$$

Voer de substitutie $\theta = \text{bgcos}\ x$ in, waardoor bovenstaande vergelijking wordt

$$T_n(\theta) = \cos(n\theta) \qquad \text{met} \qquad \theta \in [0, \pi]\ . \tag{5.28}$$

Er kan een recursiebetrekking afgeleid worden door vast te stellen dat

$$\begin{aligned} T_{n+1}(\theta) &= \cos((n+1)\theta) = \cos(n\theta)\cos\theta - \sin(n\theta)\sin\theta \\ T_{n-1}(\theta) &= \cos((n-1)\theta) = \cos(n\theta)\cos\theta + \sin(n\theta)\sin\theta \end{aligned}$$

waaruit

$$T_{n+1}(\theta) = 2\cos(n\theta)\cos\theta - T_{n-1}(\theta)\,.$$

Dit terug uitgedrukt in termen van de veranderlijke x leidt tot

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \qquad \text{voor elke } 1 \leq n\,. \tag{5.29}$$

Vermits

$$T_0(x) = \cos(0.\,\text{bgcos}\ x) = 1 \tag{5.30}$$

$$T_1(x) = \cos(1.\,\text{bgcos}\ x) = x \tag{5.31}$$

volgen de overige Chebyshev veeltermen gemakkelijk uit (5.29), nl.

$$T_2(x) = 2xT_1(x) - T_0(x) = 2x^2 - 1 \tag{5.32}$$

$$T_3(x) = 2xT_2(x) - T_1(x) = 4x^3 - 3x \tag{5.33}$$

$$T_4(x) = 2xT_3(x) - T_2(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1\ , \ \text{enz...} \tag{5.34}$$

Uit de recursiebetrekking (5.29) van de Chebyshev veeltermen is gemakkelijk af te leiden dat, voor elk $n \geq 1$, T_n een veelterm is van graad n met 2^{n-1} als coëfficiënt van x^n.

Theorema 5.3.1

De Chebyshev veelterm T_n van graad $n \geq 1$ bezit n enkelvoudige nulpunten in $[-1, 1]$ bij

$$\bar{x}_k = \cos\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big) \qquad (k = 1, 2, \ldots, n)\,. \tag{5.35}$$

Daarenboven, bezit T_n extremum punten bij

$$\bar{x}'_k = \cos\Big(\frac{k\pi}{n}\Big) \qquad (k = 0, \ldots, n) \tag{5.36}$$

met

$$T_n(\bar{x}'_k) = (-1)^k \qquad (k = 0, 1, \ldots, n)\,. \tag{5.37}$$

Bewijs

Als $\bar{x}_k = \cos\Big(\dfrac{2k-1}{2n}\,\pi\Big)$ voor $k = 1, 2, \ldots, n$ dan is

$$\begin{aligned} T_n(\bar{x}_k) &= \cos(n\,\mathrm{bgcos}\;\bar{x}_k) = \cos\left(n\,\mathrm{bgcos}\Big(\cos\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big)\Big)\right) \\ &= \cos\Big(\frac{2k-1}{2}\,\pi\Big) = 0\,. \end{aligned}$$

Aldus is $\bar{x}_k$ een nulpunt van T_n voor elke $k = 1, 2, \ldots, n$. Vermits T_n een veelterm van graad n is, moeten alle nulpunten van T_n van deze vorm zijn.

Om het tweede deel van dit theorema aan te tonen, beschouwen we vooreerst

$$T'_n(x) = \frac{d}{dx}\,[\cos(n\,\mathrm{bgcos}\;x)] = \frac{n\,\sin(n\,\mathrm{bgcos}\;x)}{\sqrt{1-x^2}}\,.$$

Voor $1 \le k \le n-1$ is dan

$$T'_n(\bar{x}'_k) = \frac{n\,\sin(n\,\mathrm{bgcos}(\cos\dfrac{k\pi}{n})))}{\sqrt{1-\cos^2(\dfrac{k\pi}{n})}} = \frac{n\,\sin(k\pi)}{\sin(\dfrac{k\pi}{n})} = 0\,.$$

Vermits bovendien T_n een veelterm van graad n is, is T'_n een veelterm van graad $(n-1)$ en treden dus alle nulpunten van T'_n op bij deze punten. De enige andere mogelijkheden voor extrema van de functie T_n treden op bij de eindpunten van het interval $[-1, 1]$, d.i. bij $\bar{x}'_0 = 1$ en $\bar{x}'_n = -1$. Vermits

$$T_n(\bar{x}'_k) = \cos\left(n\,\mathrm{bgcos}\;\Big(\cos\Big(\frac{k\pi}{n}\Big)\Big)\right) = \cos(k\pi) = (-1)^k$$

treedt een maximum op bij elke even waarde van k en een minimum bij elke oneven waarde. $\diamond$

In praktisch gebruik is het zeer dikwijls wenselijk over veeltermen te beschikken met coëfficiënt 1 bij de hoogste graadsterm. Dergelijke veeltermen worden *monisch* genoemd. Voor de Chebyshev veeltermen is de monische versie als volgt te definiëren :

$$\tilde{T}_n(x) = 2^{1-n}\,T_n(x) \qquad \text{voor elke } n \ge 1\,. \tag{5.38}$$

De recursiebetrekking voor $\tilde{T}_n$ volgt rechtstreeks uit (5.29) in combinatie met (5.38), i.e. :

$$\tilde{T}_0(x) = 1 \ , \quad \tilde{T}_1(x) = x \ , \quad \tilde{T}_2(x) = x^2 - \frac{1}{2}$$

en

$$\tilde{T}_{n+1}(x) = x\tilde{T}_n(x) - \frac{1}{4}\tilde{T}_{n-1}(x) \qquad \text{voor elke } n > 2 \ . \tag{5.39}$$

Omwille van het lineair verwantschap (5.38) tussen T_n en $\tilde{T}_n$ impliceert theorema 5.3.1 dat de nulpunten van $\tilde{T}_n$ eveneens optreden bij

$$\bar{x}_k = \cos\Big(\frac{2k-1}{2n}\,\pi\Big) \qquad (k = 1, 2, \ldots, n)$$

en dat de extrema van $\tilde{T}_n$ voorkomen bij

$$\bar{x}'_k = \cos\Big(\frac{k\pi}{n}\Big) \qquad (k = 0, 1, 2, \ldots, n) \, .$$

Bij deze $\bar{x}'_k$–waarden, is voor $n \geq 1$

$$\tilde{T}_n(\bar{x}'_k) = \frac{(-1)^k}{2^{n-1}} \qquad (k = 0, 1, 2, \ldots, \, n) \, .$$

Theorema 5.3.2

De veeltermen van de vorm $\tilde{T}_n$ met $n \geq 1$ hebben de eigenschap dat

$$\frac{1}{2^{n-1}} = \max_{x\in[-1,1]} |\tilde{T}_n(x)| \leq \max_{x\in[-1,1]} |p_n(x)| \tag{5.40}$$

voor alle $p_n(x)$ behorend tot de verzameling $\tilde{\Pi}_n$ van monische veeltermen van de graad n . De gelijkheid in (5.40) is alleen geldig als $p_n = \tilde{T}_n$.

Bewijs

Veronderstel dat $p_n \in \tilde{\Pi}_n$ en dat

$$\max_{x\in[-1,1]} |p_n(x)| \leq \frac{1}{2^{n-1}} = \max_{x\in[-1,1]} |\tilde{T}_n(x)|, .$$

Definieer dan $Q = \tilde{T}_n - p_n$. Vermits $\tilde{T}_n$ en p_n beide monische veeltermen zijn van graad n, is Q een veelterm van graad ten hoogste $(n-1)$. Bovendien geldt in de extremum punten van $\tilde{T}_n$

$$Q(\bar{x}'_k) = \tilde{T}_n(\bar{x}'_k) - p_n(\bar{x}'_k) = \frac{(-1)^k}{2^{n-1}} - p_n(\bar{x}'_k) \ .$$

Het feit dat $|p_n(x'_k)| \leq \dfrac{1}{2^{n-1}}$ impliceert dat voor $k = 0, 1, \ldots, n$

$$\begin{array}{ll} Q(\bar{x}'_k) \leq 0 & \text{wanneer } k \text{ oneven is}, \quad \text{en} \\ Q(\bar{x}'_k) \geq 0 & \text{wanneer } k \text{ even is}. \end{array}$$

Vermits Q continu is, kan het middelwaardetheorema gebruikt worden om hieruit te bewijzen dat de $(n-1)^{de}$ graadsveelterm Q tenminste n nulpunten in het interval $[-1, 1]$ bezit, wat onmogelijk is tenzij $Q \equiv 0$. Dit impliceert $p_n = \tilde{T}_n$. $\diamond$

Theorema 5.3.2 kan nu gebruikt worden om te antwoorden op de vraag waar de interpolatieknooppunten moeten gekozen worden om de fout in de Lagrange interpolatieveelterm te minimalizeren. Formule (5.6) toegepast op het interval $[-1, 1]$ voor een functie $f(x)$ die $(n+1)$ maal afleidbaar is in $[-1, 1]$ en voor een $\xi_x \in [-1, 1]$ leest

$$f(x) = p_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\,(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)$$

waarbij $p_n(x)$ hier opnieuw de Lagrange vorm voorstelt. Om de fout in het algemeen zo klein mogelijk te maken, kan men zoeken naar waarden voor x_0, x_1, $\ldots$, x_n die de grootheid

$$|(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)|$$

extremeren in het interval $[-1, 1]$. Vermits echter $(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)$ een monische veelterm van de graad $(n+1)$ is impliceert theorema 6.5.2 dat dit minimum bereikt wordt als en slechts als

$$(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n) = \tilde{T}_{n+1}(x).$$

Wanneer x_k gekozen wordt als de $(k+1)^{de}$ wortel van $\tilde{T}_{n+1}$ voor elke $k = 0, 1, \ldots, n$, d.w.z. x_k wordt geïdentificeerd met

$$\bar{x}_{k+1} = \cos\Big(\frac{2k+1}{2(n+1)}\,\pi\Big) \quad (k = 0, 1, \ldots, n)$$

dan is $\max\limits_{x \in [-1,1]} |\tilde{T}_{n+1}(x)| = 2^{-n}$. Dit heeft tot gevolg dat

$$\max_{x \in [-1,1]} |(x - \bar{x}_1)(x - \bar{x}_2)\ldots(x - \bar{x}_{n+1})| = \frac{1}{2^n} \tag{5.41}$$

$$\leq \max_{x \in [-1,1]} |(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)| \tag{5.42}$$

voor elke keuze van x_0, $x_1, \ldots, x_n$ uit het interval $[-1,1]$. Hieruit volgt dat als $p_n(x)$ de interpolatieveelterm van graad tenminste n is met de wortels van $T_{n+1}(x)$ als knooppunten er dan geldt dat

$$\max_{x\in[-1,1]} |f(x) - p_n(x)| \leq \frac{1}{2^n(n+1)!} \max_{x\in[-1,1]} |f^{(n+1)}(x)|\,. \tag{5.43}$$

Deze techniek om punten te kiezen die de fout op de interpolatieveelterm minimalizeert kan gemakkelijk uitgebreid worden tot een willekeurig gesloten interval $[a,b]$ door gebruik te maken van de verandering van onafhankelijk veranderlijke

$$\tilde{x} = \frac{1}{2}[(b-a)\bar{x} + a + b] \tag{5.44}$$

om aldus de getallen $\bar{x}_k$ in het interval $[-1,1]$ te transformeren in de corresponderende getallen $\tilde{x}_k$ in het interval $[a,b]$.

5.4 Hermite interpolatie

Voor een verscheidenheid van problemen is het nuttig te beschikken over een interpolatieveelterm $p(x)$ die in een reeks punten dezelfde waarde bezit als een functie $f(x)$ maar die daarbij nog de eigenschap bezit dat de afgeleide veelterm $p'(x)$ in die punten samenvalt met de afgeleide functie $f'(x)$, m.a.w. we zoeken $p(x)$ zodat

$$p(x_i) = y_i\,, \quad p'(x_i) = y_i'\,, \quad i = 1, \ldots, n \tag{5.45}$$

waarbij $x_1, \ldots, x_n$, n verschillende abscispunten zijn en $y_1, \ldots, y_n$, $y_1', \ldots, y_n'$ gegeven functiewaarden en afgeleiden zijn. Er zijn door (5.45) $2n$ voorwaarden opgelegd en dus pogen we een veelterm $p(x)$ te construeren van graad hoogstens $2n-1$.

Om het bestaan en de enigheid van $p(x)$ aan te tonen, zullen we in de lijn van voorgaande paragrafen volgende functies invoeren :

$$\begin{aligned}
\Psi(x) &= (x-x_1)\ldots(x-x_n) \\
l_i(x) &= \frac{(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_1)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)} = \frac{\Psi(x)}{(x-x_i)\Psi'(x_i)}
\end{aligned} \tag{5.46}$$

$$\tilde{h}_i(x) = (x-x_i)[l_i(x)]^2 \tag{5.47}$$

$$h_i(x) = [1 - 2l_i'(x_i)(x-x_i)][l_i(x)]^2\,. \tag{5.48}$$

Dan is voor elke $i, j = 1, \ldots, n$:

$$\begin{aligned}
h_i'(x_j) &= \tilde{h}_i(x_j) = 0 \\
h_i(x_j) &= \tilde{h}_i'(x_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}\,.
\end{aligned}$$

De interpolatieveelterm die beantwoordt aan het voorschrift (5.45) wordt dan gegeven door

$$H_n(x) = \sum_{i=1}^{n} y_i h_i(x) + \sum_{i=1}^{n} y'_i \tilde{h}_i(x)\,. \tag{5.49}$$

Om de enigheid van $H_n(x)$ aan te tonen, veronderstellen we dat er een tweede veelterm $G(x)$, met graad $\leq 2n-1$, bestaat die voldoet aan (5.45). Definieer dan $R = H_n - G$. Dan volgt uit (5.45)

$$R(x_i) = R'(x_i) = 0\ , \qquad i = 1, 2, \ldots, n$$

d.w.z. R is een veelterm van graad $\leq 2n-1$ die n dubbele wortels $x_1,\ x_2, \ldots, x_n$ bezit, d.i. :

$$R(x) = q(x)(x-x_1)^2 \ldots (x-x_n)^2\ .$$

Als $q(x) \neq 0$ dan is de graad $R(x) \geq 2n$ wat in strijd is met het ondersteldde, m.a.w. $R(x) \equiv 0$.

Om een meer berekenbare vorm dan (5.49) te bekomen en tevens ook een uitdrukking voor de foutterm, beschouw eerst de interpolatieveelterm voor $f(x)$ in de punten $z_1,\ z_2, \ldots, z_{2n}$ (cfr. (5.16)).

$$\begin{aligned} p_{2n-1}(x) \quad &= \quad f(z_1) + (x-z_1) f[z_1, z_2] + \ldots \\ &\qquad\qquad (x-z_1)\ldots(x-z_{2n-1}) f[z_1, \ldots, z_{2n}] \end{aligned} \tag{5.50}$$

met foutterm (cfr.(5.17))

$$f(x) - p_{2n-1}(x) = (x-z_1)\ldots(x-z_{2n}) f[z_1, \ldots, z_{2n}, x]\,. \tag{5.51}$$

We kunnen in (5.50) abscispunten laten samenvallen, bv.

$$z_1 = z_2 = x_1\ , \quad z_3 = z_4 = x_2, \quad \ldots, \quad z_{2n-1} = z_{2n} = x_n$$

om te bekomen

$$\begin{aligned} p_{2n-1}(x) \quad &= \quad f(x_1) + (x-x_1) f[x_1, x_1] + (x-x_1)^2 f[x_1, x_1, x_2] + \ldots \\ &\qquad +(x-x_1)^2 \ldots (x-x_{n-1})^2 (x-x_n) f[x_1, x_1, \ldots, x_n, x_n]\,. \end{aligned} \tag{5.52}$$

Dit is een veelterm van graad $\leq 2n-1$. Beschouw voor de foutterm dezelfde transformatie zodat

$$f(x) - p_{2n-1}(x) = (x-x_1)^2 \ldots (x-x_n)^2 f[x_1,\ x_1, \ldots, x_n,\ x_n,\ x]\,. \tag{5.53}$$

Theorema 5.4.1

$p_{2n-1}(x) = H_n(x)$ *als* $f(x)$ $(2n+1)$ *maal continu afleidbaar is.*

Bewijs

Uit (5.53) volgt dat

$$f(x_i) - p_{2n-1}(x_i) = 0 \ , \qquad i = 1, 2, \ldots, n \, .$$

Evenzo is

$$f'(x) - p'_{2n-1}(x) = (x-x_1)^2 \ldots (x-x_n)^2 \frac{d}{dx} f[x_1, \, x_1, \, \ldots, \, x_n, \, x_n, \, x]$$
$$+2f[x_1, \, x_1, \ldots, x_n, \, x_n, \, x] \sum_{i=1}^{n} \left[(x-x_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} (x-x_j)^2 \right]$$

waaruit

$$f'(x_i) - p'_{2n-1}(x_i) = 0 \ , \qquad i = 1, \ldots, n \, .$$

Dus graad $p_{2n-1} \leq 2n-1$ en bovendien voldoet $p_{2n-1}(x)$ aan (5.45) aangezien $y_i = f(x_i)$ en $y'_i = f'(x_i)$. Door de enigheid van de Hermite interpolatieveelterm is $p_{2n-1} = H_n$.
$\diamond$

Dus (5.52) is een differentiequotiënt formule voor de berekening van $H_n(x)$ en (5.53) levert de bijhorende fout formule, i.e.

$$f(x) - H_n(x) = [\Psi(x)]^2 f[x_1, \, x_1, \ldots, x_n \, x_n, \, x] \, .$$

Als bij de berekening van de differentiequotiënten onbepaaldheden optreden van de vorm (0/0) moeten die opgeheven worden door een limietberekening (zie ook voorbeeld 5.4.1).

Voorbeeld 5.4.1

De meest verspreide vorm van Hermite interpolatie is waarschijnlijk de kubische veelterm die moet voldoen aan

$$p(a) = f(a) \qquad p'(a) = f'(a)$$
$$p(b) = f(b) \qquad p'(b) = f'(b) \, .$$

Formule(5.49) wordt in dit geval

$$H_2(x) = \Big(1 + 2\frac{x-a}{b-a}\Big)\Big(\frac{b-x}{b-a}\Big)^2 f(a) + \Big(1 + 2\frac{b-x}{b-a}\Big)\Big(\frac{x-a}{b-a}\Big)^2 f(b)$$
$$+\frac{(x-a)(b-x)^2}{(b-a)^2} f'(a) - \frac{(x-a)^2(b-x)}{(b-a)^2} f'(b)\,. \qquad (5.54)$$

Formule (5.52) leidt tot

$$H_2(x) = f(a) + (x-a)f[a,a] + (x-a)^2 f[a,a,b] + (x-a)^2(x-b)f[a,a,b,b]\,.$$

Hierin is

$$\begin{aligned}
f[a,a] &= \lim_{x\to a} \frac{f(x)-f(a)}{x-a} = f'(a)\\
f[a,a,b] &= \frac{f[a,b]-f'(a)}{b-a}\\
f[a,a,b,b] &= \frac{f[a,b,b]-f[a,a,b]}{b-a} = \frac{f'(b)-2f[a,b]+f'(a)}{(b-a)^2}\\
f[a,b] &= \frac{f(b)-f(a)}{(b-a)}\,.
\end{aligned}$$

Dit alles samenbrengend leidt opnieuw tot (5.54).
De corresponderende foutterm volgt uit (5.53), nl.

$$f(x) - H_2(x) = (x-a)^2(x-b)^2 f[a,a,b,b,x]$$

wat, rekening houdend met (5.17), ook te schrijven is als

$$f(x) - H_2(x) = \frac{(x-a)^2(x-b)^2}{24} f^{(4)}(\xi_x)\,, \quad \xi_x \in \mathcal{H}(a,b,x)\,.$$

5.5 Kubische spline interpolatie

In de voorgaande paragrafen beschouwden we de benadering van willekeurige functies in gesloten intervallen door gebruik te maken van veeltermen. Alhoewel deze benaderingsmethoden in veel gevallen doeltreffend zijn, kan het oscillerend karakter van hoge graadsveeltermen en de eigenschap dat een fluctuatie over een klein deel van het interval grote verschuivingen over het ganse gebied tot gevolg kan hebben, beperkend zijn voor hun gebruik.

Een alternatieve werkwijze die kan gebruikt worden om interpolatieveeltermen te bekomen, is het interval te verdelen in een verzameling subintervallen en in elk interval een in 't algemeen verschillende benaderende veelterm te construeren. Deze wijze van werken is bekend als stuksgewijze veeltermbenadering. Het eenvoudigste type van stuksgewijze veeltermbenadering is de zgn. stuksgewijze lineaire interpolatie die erin bestaat een verzameling gegeven punten

$$\{(x_0, f(x_0)),\ (x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n))\}$$

te verbinden met rechte lijnstukken. Het behandelen van benaderingsproblemen met functies van dit type, i.e. lineaire functies of misschien iets beter, kwadratische veeltermen tussen drie opeenvolgende punten, heeft het nadeel dat er bij elk eindpunt van een subinterval geen enkele zekerheid is over afleidbaarheid; d.w.z. geometrisch gezien dat de interpolatiefunctie niet noodzakelijk glad verloopt bij die punten.

Om aan bovengenoemd probleem een oplossing te geven kan men tussen twee opeenvolgende abscispunten o.m. gebruik maken van de zgn. kubische spline interpolatie. Een kubische veelterm bezit vier coëfficiënten; dit laat voldoende vrijheid om te verzekeren dat de interpolatieveelterm continu afleidbaar is in het ganse interval en er voor te zorgen dat ze daarenboven een continue tweede afgeleide bezit.

Definitie.

Gegeven een functie f gedefinieerd in $[a, b]$ en een verzameling getallen, knooppunten genoemd, $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, dan voldoet de kubische spline S voor f aan de volgende voorwaarden :

(a) S is een kubische veelterm, voorgesteld als S_j in het subinterval $[x_j, x_{j+1}]$ voor elke $j = 0, 1, \ldots, n-1$;

(b) $S(x_j) = f(x_j)$ voor elke $j = 0, 1, \ldots, n$;

(c) $S_{j+1}(x_{j+1}) = S_j(x_{j+1})$ voor elke $j = 0, 1, \ldots, n-2$;

(d) $S'_{j+1}(x_{j+1}) = S'_j(x_{j+1})$ voor elke $j = 0, 1, \ldots, n-2$;

(e) $S''_{j+1}(x_{j+1}) = S''_j(x_{j+1})$ voor elke $j = 0, 1, \ldots, n-2$;

(f) aan één van de volgende stellen randvoorwaarden is voldaan :

$$\text{(i)}\quad S''(x_0) = S''(x_n) = 0 \qquad \text{(vrije begrenzing)} \tag{5.55}$$

$$\text{(ii)}\quad S'(x_0) = f'(x_0) \quad \text{en} \quad S'(x_n) = f'(x_n) \tag{5.56}$$

(eindpuntsafgeleide voorwaarde) .

◇

Alhoewel kubische splines gedefinieerd kunnen worden met andere randvoorwaarden, zijn bovenstaande condities voldoende voor onze verdere bespreking. Wanneer de vrije begrenzing optreedt, wordt de spline *natuurlijk* genoemd. In 't algemeen zal (ii) leiden tot betere benaderingen vermits door (5.56) meer informatie over de functie zelf wordt geïncludeerd; nochtans kan hier slechts mee gewerkt worden als we ofwel de waarden van de afgeleide kennen in de eindpunten, ofwel er een goede benadering voor hebben.

Om nu de kubische spline voor een gegeven functie f te construeren, kunnen de voorwaarden uit de bovenstaande definitie opgelegd worden aan de kubische veeltermen

$$S_j(x) = a_j + b_j(x - x_j) + c_j(x - x_j)^2 + d_j(x - x_j)^3 \quad x \in [x_j, x_{j+1}]$$

voor elke $j = 0, 1, \ldots, n-1$.
We zien onmiddellijk dat

$$S_j(x_j) = a_j = f(x_j) \qquad \text{(voorwaarde (b))}$$

en als voorwaarde (c) wordt opgelegd

$$\begin{aligned} a_{j+1} &= S_{j+1}(x_{j+1}) = S_j(x_{j+1}) \\ &= a_j + b_j(x_{j+1} - x_j) + c_j(x_{j+1} - x_j)^2 + d_j(x_{j+1} - x_j)^3 \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad \text{voor elke } j = 0, 1, \ldots, n-2\,. \end{aligned}$$

Vermits de term $(x_{j+1} - x_j)$ frequent in de verdere afleiding zal optreden, voeren we volgend kortschrift in

$$h_j = x_{j+1} - x_j \qquad \text{voor} \qquad j = 0, 1, \ldots, n-1\,.$$

Als we daarbij $a_n = f(x_n)$ definiëren, merken we op dat

$$a_{j+1} = a_j + b_j h_j + c_j h_j^2 + d_j h_j^3 \quad \text{voor} \quad j = 0, 1, \ldots, n-1\,. \tag{5.57}$$

Op een analoge wijze, definieer $b_n = S'(x_n)$ of $b_n = S'_{n-1}(x_n)$ en bemerk dat

$$S'_j(x) = b_j + 2c_j(x - x_j) + 3d_j(x - x_j)^2$$

waaruit $S'_j(x_j) = b_j$ voor elke $j = 0, 1, \ldots, n-1$. Voorwaarde (d) toepassend, levert ons

$$b_{j+1} = b_j + 2c_j h_j + 3d_j h_j^2 \quad \text{voor elke} \quad j = 0, 1, \ldots, n-1\,. \tag{5.58}$$

Een bijkomende relatie tussen de coëfficiënten van S_j wordt bekomen door het definiëren van $c_n = S''(x_n)/2$ en door het toepassen van voorwaarde (e), i.e.

$$c_{j+1} = c_j + 3d_j h_j \qquad \text{voor elke } j = 0, 1, \ldots, n-1\,. \tag{5.59}$$

Uit (5.59) kunnen we d_j oplossen; deze waarde kan dan gesubstitueerd worden in (5.57) en (5.58), i.e.

$$a_{j+1} = a_j + b_j h_j + \frac{h_j^2}{3}(2c_j + c_{j+1}) \qquad \text{en} \tag{5.60}$$

$$b_{j+1} = b_j + h_j(c_j + c_{j+1}) \quad \text{voor elke } j = 0, 1, \ldots, n-1\,. \tag{5.61}$$

Het finale verband tussen de beschouwde coëfficiënten kan bekomen worden door (5.60) op te lossen naar b_j , i.e.

$$b_j = \frac{1}{h_j}(a_{j+1} - a_j) - \frac{h_j}{3}(2c_j + c_{j+1}) \tag{5.62}$$

en dan, met verschuiving van de index met één eenheid,

$$b_{j-1} = \frac{1}{h_{j-1}}(a_j - a_{j-1}) - \frac{h_{j-1}}{3}(2c_{j-1} + c_j)\,.$$

Deze waarden worden nu gesubstitueerd in de vergelijking, afgeleid uit (5.61) waarbij de index met één verminderd is, i.e.

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{h_j}(a_{j+1} - a_j) - \frac{h_j}{3}(2c_j + c_{j+1}) \\
&\quad = \frac{1}{h_{j-1}}(a_j - a_{j-1}) - \frac{h_{j-1}}{3}(2c_{j-1} + c_j) + h_{j-1}(c_{j-1} + c_j)
\end{aligned}$$

of

$$\begin{aligned}
h_{j-1}\,c_{j-1} + 2(h_{j-1} + h_j)c_j + h_j c_{j+1} \quad &= \quad \frac{3}{h_j}(a_{j+1} - a_j) - \frac{3}{h_{j-1}}(a_j - a_{j-1}) \\
&\qquad \text{voor elke } j = 1, 2, \ldots, n-1\,.
\end{aligned} \tag{5.63}$$

D.i. een stelsel lineaire vergelijkingen. De enige onbekenden erin zijn de $\{c_j\}_{j=0}^{n}$ vermits de waarden $\{h_j\}_{j=0}^{n-1}$ volgen uit de ligging van de knooppunten en de $\{a_j\}_{j=0}^{n}$ gegeven worden door de functiewaarden in de knooppunten. Merk op dat eenmaal de $\{c_j\}_{j=0}^{n}$ gekend, het eenvoudig is uit (5.62) de $\{b_j\}_{j=0}^{n-1}$ af te leiden en uit (5.59) de $\{d_j\}_{j=0}^{n-1}$ te deduceren om finaal de kubische veeltermen $\{S_j\}_{j=0}^{n-1}$ te construeren.

Er blijft te beantwoorden :

– Kunnen de waarden van $\{c_j\}_{j=0}^{n}$ bepaald worden uit het stelsel (5.63) ?
– Is deze oplossing enig ?

De volgende theorema's tonen aan dat als één van de stellen randvoorwaarden (f) uit de definitie opgelegd wordt, het antwoord op beide vragen affirmatief is.

Theorema 5.5.1

Als f een functie is gedefinieerd over $[a, b]$ dan bezit f een unieke natuurlijke kubische spline, d.w.z. er bestaat een unieke S die voldoet aan $S''(a) = S''(b) = 0$.

Bewijs

Met de gebruikelijke notatie, $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ impliceert de zojuist genoemde randvoorwaarde dat $c_n = S''(x_n)/2 = 0$ en dat

$$0 = S''(x_0) = 2c_0 + 6d_0(x_0 - x_0)\,,$$

zodat $c_0 = 0$.
De twee vergelijkingen $c_0 = 0$ en $c_n = 0$ tezamen met de vergelijkingen in (5.63) vormen een stelsel lineaire vergelijkingen van de vorm $Ax = b$ met A de volgende matrix

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\ h_0 & 2(h_0+h_1) & h_1 & & & & & \vdots \\ 0 & h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & & & 0 \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

en met b en x respectievelijk de volgende vectoren :

$$b = \begin{bmatrix} 0 \\ \dfrac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \dfrac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ \vdots \\ \dfrac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1}) - \dfrac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \text{en} \qquad x = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

Dergelijk stelsel is van de vorm (2.23) en bezit een unieke oplossing. $\diamond$

Theorema 5.5.2

Als f een functie is gedefinieerd over $[a,b]$ dan bezit f een unieke kubische spline die voldoet aan de randvoorwaarden $S'(a) = f'(a)$ en $S'(b) = f'(b)$.

Bewijs

Uit $S_0'(a) = S'(x_0) = b_0$ en uit (5.62) voor $j = 0$ volgt

$$f'(a) = \frac{a_1 - a_0}{h_0} - \frac{h_0}{3}(2c_0 + c_1)$$

waaruit

$$2h_0c_0 + h_0c_1 = \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) - 3f'(a)\,. \tag{5.64}$$

Evenzo

$$f'(b) = b_n = b_{n-1} + h_{n-1}(c_{n-1} + c_n)$$

zodat (5.62) met $j = n - 1$ impliceert dat

$$\begin{aligned} f'(b) &= \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{h_{n-1}}{3}(2c_{n-1} + c_n) + h_{n-1}(c_{n-1} + c_n) \\ &= \frac{a_n - a_{n-1}}{h_{n-1}} + \frac{h_{n-1}}{3}(c_{n-1} + 2c_n) \end{aligned}$$

en dus

$$h_{n-1}\, c_{n-1} + 2h_{n-1}\, c_n = 3f'(b) - \frac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1})\,. \tag{5.65}$$

Vergelijkingen (5.63), (5.64) en (5.65) bepalen opnieuw een stelsel lineaire vergelijkingen van de vorm $Ax = b$, met

$$A = \begin{bmatrix} 2h_0 & h_0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ h_0 & 2(h_0 + h_1) & h_1 & & & \vdots \\ 0 & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & & \vdots \\ \vdots & & & & & 0 \\ 0 & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & & h_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & h_{n-1} & & 2h_{n-1} \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) - 3f'(a) \\ \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ \vdots \\ \frac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1}) - \frac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) \\ 3f'(b) - \frac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1}) \end{bmatrix} \qquad x = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

Dergelijk stelsel is opnieuw van de vorm (2.23) en bezit dus ook een unieke oplossing.

◇

Algemene nota

Zoals reeds opgemerkt in het begin van dit hoofdstuk, is de interpolatietheorie de basis voor de ontwikkeling van methoden voor numerieke afleiding, integratie, en de oplossingsbepaling van differentiaalvergelijkingen. Deze onderwerpen zullen één voor één aan bod komen in de cursus "Numerieke Analyse". De invoering van computers betekende een revolutie in de numerieke analyse en ook in de interpolatietheorie. Vóór de komst van computers werden berekeningen uitgevoerd met de hand; dit betekende dat numerieke methoden werden bedacht om het handrekenwerk te minimalizeren. Men maakte uitgebreid gebruik van tabellen om rekenwerk, uitgevoerd door anderen, niet te moeten herhalen. Om niet getabelleerde tussenliggende waarden te genereren, werden interpolatie formules, gebaseerd op differenties, veelvuldig gebruikt. Aldus werd een nieuw onderzoeksdomein gecreëerd de zgn. *eindige differentie calculus*. Ook nu nog is er plaats voor handrekenwerk in combinatie met zakrekenmachines, vooral bij het gebruik van functies die optreden in wiskundige natuurkunde. Een goed basiswerk met uitgebreide tabellen is M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions, National Bureau of Standards (1964).*

Naast Gauss en Newton, wier bibliografische nota's reeds in een vorig hoofdstuk aan de orde kwamen, is Lagrange in de theorie van de veelterminterpolatie een belangrijke figuur. *Joseph Louis Lagrange* (1736–1813), een eminent Frans-Italiaans wiskundige, auteur van monumentale werken zoals zijn "Mécanique analytique" en "Théorie des fonctions analytiques", werd reeds op dertigjarige leeftijd algemeen erkend als de grootste mathematicus van zijn tijd. Zijn veelzijdig œuvre is van onschatbare waarde gebleken, in het bijzonder voor de ontwikkeling van de analyse. Hiervan getuigen de talrijke formules en methodes die zijn naam dragen. Veel Britse onderzoekers hebben kennis genomen van Newton's bijdrage tot de interpolatietheorie, onder hen *James Stirling* (1692–1770) die opgeleid werd in Glasgow en aan het Ballid College in Oxford. Omwille van politieke redenen week hij uit naar Italië en aanvaardde een professoraat in Venetië. Vanaf 1725 was hij terug in Londen, waar zijn contacten met Newton hem inspireerde om meer "gestroomlijnde" vormen voor de interpolatieveelterm af te leiden. *Friedrich Wilhelm Bessel* (1784–1846) was één van de leidinggevende sterrenkundigen van zijn eeuw; hij is vooral bekend voor de functies die zijn naam dragen. De Fransman *Charles Hermite* (1822–1901) heeft veel belangrijk onderzoek verricht op het gebied van de hogere analyse (o.m. over de functies van Abel en de elliptische functies). Hij leverde ook een bewijs van het transcendent karakter van het getal e, de basis van de natuurlijke logaritmen. *Alexandre Théophile Vandermonde* (1735–1796) was lid van de Académie des Sciences te Parijs en directeur van de Conservatoire des Arts et Métiers. Hij droeg bij tot de theorie van de vergelijkingen en tot de algemene theorie van determinanten.
