

136 E. 3734/77

Sonderdruck aus
METHODEN UND VERFAHREN
DER
MATHEMATISCHEN PHYSIK

Band 5 · Februar 1971

BIBLIOGRAPHISCHES INSTITUT AG
MANNHEIM/WIEN/ZÜRICH



E. 3734/77

DAS RESTGLIED IN EINIGEN FORMELN DER NUMERISCHEN
INTEGRATION VON DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Tiberiu POPOVICIU

1. In vielen Formeln, die zur numerischen Integration von gewöhnlichen Differentialgleichungen benutzt werden, ist der Rest ein lineares (additives und homogenes) Funktional $R[f]$, das auf einer linearen Menge S erklärt ist, deren Elemente f stetige Funktionen sind, die auf einem Intervall I (dessen Länge von Null verschieden ist) der reellen Achse definiert sind. Wir setzen weiterhin voraus, daß die Elemente von S genügend oft differenzierbar sind, damit die betrachteten Formeln sinnvoll sind und daß S alle Polynome enthält.

Untersucht man die Struktur des Funktionals $R[f]$, so spielt die sogenannte einfache Form dieses linearen Funktionals eine bedeutende Rolle. Darunter verstehen wir folgendes:

Ein lineares Funktional $R[f]$ heißt von einfacher Form, wenn es eine ganze Zahl $n \geq -1$ gibt, so daß $R[x^{n+1}] \neq 0$ ist und

$$(1) \quad R[f] = R[x^{n+1}][\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n+2}; f]$$

für alle $f \in S$, wobei ξ_v , $v=1, 2, \dots, n+2$ voneinander ver-

3734: J 77. 27

schiedene Punkte des Intervalls I sind, die im allgemeinen von der Funktion f abhängen.

Dabei bezeichnet $[y_1, y_2, \dots, y_{k+1}; f]$ die dividierte Differenz k -ter Ordnung der Funktion f , gebildet mit den Knotenpunkten $y_1, y_2, \dots, y_{k+1}$. Diese Knotenpunkte können sämtlich voneinander verschieden sein oder nicht. Im letzteren Fall wird die dividierte Differenz bekanntlich mit Hilfe der Ableitungen der Funktion f definiert. So gilt z.B.

$$\underbrace{[y, y, \dots, y; f]}_{k+1} = \frac{1}{k!} f^{(k)}(y)$$

Bezeichnen wir der Einfachheit halber mit $D_k[f]$ die dividierte Differenz k -ter Ordnung der Funktion f , gebildet mit einem gewissen System von $k+1$ voneinander verschiedenen Knotenpunkten aus dem Intervall I , so kann man Beziehung (1) wie folgt schreiben:

$$R[f] = R[x^{n+1}] D_{n+1}[f].$$

2. Ist das lineare Funktional $R[f]$ von einfacher Form, dann hat es den Genauigkeitsgrad n , d.h. für alle Polynome n -ten Grades ist es Null, jedoch nicht für alle Polynome $(n+1)$ -ten Grades (das einzige Polynom mit dem effektiven Grad -1 , ist das mit Null identische Polynom). Dabei bezeichnet n die ganze Zahl, für die die entsprechende Beziehung (1) gilt. Diese Bedingung ist jedoch im allgemeinen nicht hinreichend dafür, daß $R[f]$ von einfacher Form ist.

Dagegen gilt der folgende Satz:

Ein lineares Funktional $R[f]$ ist genau dann von einfacher Form, wenn es eine ganze Zahl $n \geq -1$ gibt, so daß $R[f] \neq 0$ ist für alle konvexen Funktionen f n -ter Ordnung aus S .

Dabei heißt eine Funktion f konvex von der Ordnung n auf I , wenn ihre dividierte Differenz $(n+1)$ -ter Ordnung, gebildet mit jedem beliebigen System von $n+2$ voneinander verschiedenen Punkten des Intervalls I , positiv ist. Sind diese dividierten Differenzen nicht negativ, so sprechen wir von einer nichtkonvexen Funktion n -ter Ordnung. Schließlich heißt eine Funktion f konkav bzw. nichtkonvex von der Ordnung n , wenn $-f$ konvex bzw. nichtkonvex von der Ordnung n ist.

Der Beweis des obigen Satzes ist einfach. Weitere damit im Zusammenhang stehende Eigenschaften habe ich in meinen früheren Arbeiten [3], [4], [5] angegeben.

Ist $n \geq 0$, so können die Punkte ξ_v , $v=1, 2, \dots, n+2$ in der Formel (1) sogar aus dem Inneren des Intervalls I gewählt werden.

3. Ist die dividierte Differenz $(n+1)$ -ter Ordnung der Funktion f beschränkt, d.h. gilt

$$(2) \quad |[x_1, x_2, \dots, x_{n+2}; f]| \leq M \quad (M \text{ endlich})$$

für alle Systeme von $n+2$ voneinander verschiedenen Punkten $x_1, x_2, \dots, x_{n+2}$ aus I , so erhält man aus (1) folgende Abschätzung für $R[f]$:

$$(3) \quad |R[f]| \leq |R[x^{n+1}]| \cdot M.$$

Ist die Funktion $f^{(n+1)}$ -mal differenzierbar, so kann man Formel (1) durch

$$(4) \quad R[f] = R[x^{n+1}] \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad \xi \in I$$

ersetzen. Für $n \geq 0$ genügt es vorauszusetzen, daß die Ableitung $f^{(n+1)}$ im Inneren von I existiert und in (4) kann man dann ξ aus dem Inneren von I wählen.

Ist $f^{(n+1)}$ beschränkt, dann gibt es eine (endliche) Zahl M , so daß (2), also auch (3) gilt. Man kann sogar

$$M = \frac{\sup |f^{(n+1)}|}{(n+1)!}$$

annehmen.

Wir bemerken, daß man für die Formel (1) die Existenz der $(n+1)$ -ten Ableitung nicht vorauszusetzen braucht. Demnach ist Formel (1) allgemeiner als die klassische Formel (3), die dann gilt, wenn $R[f]$ von einfacher Form ist und auch die $(n+1)$ -te Ableitung $f^{(n+1)}$ existiert.

Eine hinreichende Bedingung dafür, daß die Abschätzung (2) und demnach auch (3) gilt, ist, daß $f^{(n)}$ existiert und einer gewöhnlichen Lipschitz-Bedingung genügt.

4. Um festzustellen, ob ein lineares Funktional $R[f]$ von einfacher Form ist, genügt es den vorhin erwähnten Satz anzuwenden. Man muß also zeigen, daß $R[f]$ für alle konvexen Funktionen n -ter Ordnung aus S von Null verschieden ist. Zu diesem Zweck kann man verschiedene Darstel-

lungen von $R[f]$ benutzen oder verschiedene Kriterien, die aus den Eigenschaften der konvexen Funktionen n -ter Ordnung resultieren. Solche Kriterien habe ich in meinen früheren Arbeiten [5], [6] angegeben.

Einen Fall möchte ich näher behandeln, da dieser zahlreiche Anwendungen bei der numerischen Integration von Differentialgleichungen hat.

5. Wir betrachten die lineare Approximationsformel

$$(5) \quad A[f] = \sum_{i=1}^p \sum_{j=0}^{k_i-1} a_{ij} f^{(j)}(x_i) + R[f]$$

wobei das lineare Funktional $A[f]$ auf der Menge S definiert ist. Das Restglied $R[f]$ hat dann die in Nr. 1 angegebene Gestalt.

In Formel (5) bezeichnen

1°. $x_1, x_2, \dots, x_p$ p voneinander verschiedene Punkte des Intervalls I .

2°. $k_1, k_2, \dots, k_p$ p natürliche Zahlen.

Es sind dies die Multiplizitätsordnungen der entsprechenden Knotenpunkten $x_1, x_2, \dots, x_p$. Wird jeder Knotenpunkt so oft gezählt, wie seine Multiplizitätsordnung beträgt, so haben wir im ganzen $n+1$ Knotenpunkte, wobei

$$(6) \quad n = k_1 + k_2 + \dots + k_p - 1$$

ist.

3°. a_{ij} , $j=0, 1, \dots, k_i-1$, $i=1, 2, \dots, p$ Koeffizienten, die unabhängig von der Funktion f sind. Sie können negativ, Null oder positiv sein,

4°. $f^{(j)}$ ($f^{(0)}=f$) die j -te Ableitung der Funktion f .

Ist der Rest der Formel (5) für jedes Polynom n -ten Grades gleich Null, wobei n den gleichen Wert wie in (6) hat, so sind die Koeffizienten $a_{i,j}$ eindeutig bestimmt. Man erhält sie, wenn f durch das zu f und den Knotenpunkten x_i mit den Multiplizitätsordnungen k_i gehörige Polynom L von Lagrange-Hermite ersetzt. In diesem Fall folgt dann

$$(7) \quad R[f] = A \left[\prod_{i=1}^p (x-x_i)^{k_i} [z_1, z_2, \dots, z_{n+1}, x; f] \right]$$

wobei $z_1, z_2, \dots, z_{n+1}$ die $n+1$ Knotenpunkte (voneinander verschieden oder nicht) bezeichnen. Betrachtet man die rechte Seite von Formel (7), so ergibt sich, daß das Argument von $A[f]$ in dieser Formel mit dem Rest $f-L$ der benutzten Interpolationsformel $f=L$ von Lagrange-Hermite übereinstimmt. Nimmt x den Wert eines der Knotenpunkte an, dann ist dieser Rest Null. Dieses muß bei der Deutung von $A[f-L]$ in Formel (7) stets beachtet werden.

6. In vielen wichtigen Fällen hat das Restglied $R[f]$ der Formel (5) nicht nur den von (6) angegebenen Genauigkeitsgrad n , sondern ist auch von einfacher Form.

Das Funktional $A[f]$ heißt *positiv bezüglich eines Teilintervalls I^* von I* , wenn $A[f] > 0$ ist für jede Funktion f die auf dem Intervall I^* , ausgenommen eine endliche Zahl (≥ 0) von Punkten aus I^* , positiv ist. Dabei wird stets vorausgesetzt, daß I^* mindestens zwei Punkte enthält.

Beachtet man Formel (7), so ergibt sich folgende Eigenschaft:

- 1°. Ist das lineare Funktional $A[f]$ positiv bezüglich des Teilintervalls I^* von I ,
 - 2°. sind alle Multiplizitätsordnungen k_i von Knotenpunkten aus dem Inneren von I^* gerade Zahlen (das trifft z.B. zu, wenn das Innere von I^* keinen Knotenpunkt enthält),
 - 3°. ist das Restglied $R[f]$ der Formel (5) für jedes Polynom n -ten Grades gleich Null,
- dann hat dieses Restglied $R[f]$ den Genauigkeitsgrad n und ist von einfacher Form.

Als Beispiel nehmen wir

$$A[f] = \int_a^b \omega(x) f(x) dx$$

an, wobei a, b ($a < b$) zwei endliche Punkte des Intervalls I sind, ω eine auf dem abgeschlossenen Intervall $[a, b]$ nichtnegative stetige Funktionen, die nicht identisch gleich Null sind. Die vorhin formulierte Eigenschaft kann man dann auf das Restglied der Quadraturformel

$$(8) \quad \int_a^b \omega(x) f(x) dx = \sum_{i=1}^p \sum_{j=0}^{k_i-1} a_{i,j} f^{(j)}(x_i) + R[f]$$

anwenden.

7. Viele Formeln zur numerischen Integration von Differentialgleichungen haben die Form (8) und erfüllen die angegebenen Voraussetzungen, wenn man zu Stammfunktionen verschiedener Ordnungen der Funktion f übergeht. Durch

solche Transformationen bleibt der Rest von einfacher Form.

Diese Behauptung resultiert aus folgenden Sätzen:

- 1°. Ist die Ableitung f' einer Funktion f konvex von der Ordnung n , dann ist f konvex von der Ordnung $n+1$.
- 2°. Hat $R^*[f]$ den Genauigkeitsgrad $n+1$ ($n \geq -1$) und ist von einfacher Form, wobei $R^*[f] = R[f']$ ist, dann hat $R[f]$ den Genauigkeitsgrad n und ist auch von einfacher Form.

Bezüglich weiterer Einzelheiten sei auf meine Arbeit [5] verwiesen.

Bei der Anwendung von Formeln zur numerischen Integration, wird nach einer solchen Transformation gewöhnlich die Summe, die auf der rechten Seite von Formel (8) steht, durch die linke Seite angenähert. Bei einer solchen Modifikation wird das Restglied $R[f]$ durch $-R[f]$ ersetzt, wobei sich jedoch weder der Genauigkeitsgrad ändert noch die einfache Form.

Um einige konkrete Beispiele anzuführen, möchte ich auf das ausgezeichnete Buch von L. COLLATZ [1] verweisen, in dem eine Fülle von solchen Formeln angegeben ist.

Beispiel 1. Die Formeln von Adams zur numerischen Integration haben die Form (8), wenn man zur Stammfunktion von f übergeht. In diesem Fall gibt es in dem entsprechenden offenen Intervall $]a, b[$ keine Punkte x_i . Die Integrationsformeln von Adams haben demnach ein Restglied von einfacher Form.

Beispiel 2. Nach G. KOWALEWSKI [2] gilt für die Differenz n -ter Ordnung ($n \geq 0$)

$$\Delta_h^n f(a) = \sum_{v=0}^n (-1)^{n-v} \binom{n}{v} f(a+vh) = \int_a^{a+nh} \phi(x) f^{(n)}(x) dx$$

wenn man voraussetzt, daß die n -te Ableitung der Funktion f stetig ist. ϕ bezeichnet eine stetige (nicht identisch verschwindende) Funktion, die stückweise polynomial und nicht negativ ist. ϕ ist, wenn man die heutige Terminologie benutzt, eine Spline-Funktion.

Man kann dann zeigen, daß das Restglied der Formeln

$$y_0'' \approx \frac{1}{h^2} (y_{-1} - 2y_0 + y_1)$$

$$y_{-1}'' + 10y_0'' + y_1'' \approx \frac{12}{h^2} (y_{-1} - 2y_0 + y_1)$$

$$y_1''' + y_2''' \approx \frac{2}{h^3} (y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0)$$

mit den Genauigkeitsgraden 3, 5 bzw. 6 von einfacher Form ist, u. zw. gleich $-2h^2 D_4[f]$, $36h^4 D_6[f]$, $-42h^4 D_7[f]$.

Die benutzten Bezeichnungen sind dabei diejenigen von L. Collatz.

Um z.B. die zweite der betrachteten Formeln zu erhalten, genügt es die Gaußsche Quadraturformel

$$\int_a^{a+2h} \phi(x) f(x) dx = \frac{h^2}{12} [f(a) + 10f(a+h) + f(a+2h)] + R[f]$$

anzuwenden für die Funktion $f=y$, wobei

$$\phi(x) = \begin{cases} x-a, & \text{für } x \in [a, a+h] \\ a+2h-x, & \text{für } x \in [a+h, a+2h] \end{cases}$$

ist. Analog verfährt man bei den anderen beiden Formeln.

Beispiel 3. Beachtet man die Formel

$$11f(a) + 27f(a+h) - 27f(a+2h) - 11f(a+3h) = \int_a^{a+3h} \phi(x) f'(x) dx$$

wobei ϕ eine positive und stückweise konstante Funktion ist, so folgt, daß das Restglied der Formel

$$y'_{-1} + 9y'_0 + 9y'_1 + y'_2 = \frac{1}{3h} (11y_2 + 27y_1 - 27y_0 - 11y_{-1}) + 36h^6 D_7[f]$$

mit dem Genauigkeitsgrad 6 von einfacher Form ist.

8. Es erhebt sich natürlich die Frage, welches die Struktur eines linearen Funktional $R[f]$ ist, das nicht von einfacher Form ist. Im Falle der Restglieder von Formeln zur numerischen Integration von Differentialgleichungen kann man diese Frage leicht beantworten. Ein solches Restglied hat die Gestalt

$$(9) \quad R[f] = \sum_{i=1}^p \sum_{j=0}^{k_i-1} b_{i,j} f^{(j)}(x_i).$$

Dabei kann man $x_1 < x_2 < \dots < x_p$ voraussetzen; die Koeffizienten $b_{i,j}$ sind von der Funktion f unabhängig.

Ist der Genauigkeitsgrad des linearen Funktional (9) $n \geq \max(r_1-2, r_2-2, \dots, r_p-2)$, dann haben wir eine Formel der Form

$$R[f] = \sum_{i=1}^{r-n-1} \lambda_i [y_i, y_{i+1}, \dots, y_{i+n+1}; f],$$

wobei $r=r_1+r_2+\dots+r_p$, $y_{r_1+r_2+\dots+r_{i-1}+i+s} = x_i$, ($y_{1+s} = x_1$),

$$s=0, 1, \dots, r_i-1, \quad i=1, 2, \dots, p$$

ist. Die Summe der von f unabhängigen Koeffizienten λ_i ist nicht gleich Null und es gilt nach dem Mittelwertsatz für dividierte Differenzen die Gleichheit

$$R[f] = \lambda [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n+2}; f] + \mu [\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{n+2}; f].$$

λ, μ sind zwei von f unabhängige Koeffizienten

($\lambda + \mu = \sum_{i=1}^{r-n-1} \lambda_i = R[x^{n+1}]$) und ξ_v, ξ'_v zwei Systeme von je $n+2$ voneinander verschiedenen Punkten des Intervalls I .

9. Haben die Koeffizienten λ_i alle das gleiche Vorzeichen, dann ist das lineare Funktional (9) von einfacher Form. Im entgegengesetzten Fall kann es vorkommen, daß es nicht mehr von einfacher Form ist. Gilt z.B. $\lambda_1 \lambda_2 < 0$ oder $\lambda_1 \lambda_{r-n-1} < 0$, dann kann man mit Sicherheit sagen, daß $R[f]$ nicht von einfacher Form ist [5].

Beispiel 4. Es gilt

$$3f_0 - 10f_1 + 12f_2 - 6f_3 + f_4 + 2f_1'' = -6[0, 1, 1, 1, 1, 2; f] + \\ + 12[1, 1, 1, 1, 2, 3; f] + 54[1, 1, 1, 2, 3, 4; f]$$

wo $f_i^{(j)} = f^{(j)}(i)$ ist.

Man kann nun leicht feststellen, daß das Restglied der nichtsymmetrischen Formel (in Collatzscher Schreibweise)

$$y_0''' \approx \frac{1}{2h^3} (-3y_{-1} + 10y_0 - 12y_1 + 6y_2 - y_3)$$

mit dem Genauigkeitsgrad 4 nicht von einfacher Form ist.

LITERATUR

COLLATZ, L.

- [1] Numerische Behandlung von Differentialgleichungen. 1955.

KOWALEWSKI, G.

- [2] Interpolation und genäherte Quadratur. 1932.

POPOVICIU, T.

- [3] Les fonctions convexes. Paris 1945.
- [4] Asupra formei restului în unele formule de aproximare ale analizei. Lucrările Ses.Gen.Stii.ale Acad.R.P.R., din 1950, 183-185.
- [5] Sur le reste dans certaines formules linéaires d'approximation de l'analyse. MATHEMATICA (Cluj) 1(24), 95-142 (1959).
- [6] La simplicité du rest dans certaines formules de quadrature. MATHEMATICA (Cluj) 6(29), 157-184 (1964).

Anschrift:

Prof. Tiberiu Popoviciu
Institutul de Calcul
Str. Republicii, 37
Cluj, Rumänien

(Eingegangen am 30. Juli 1970).