Neher, M.

Ein Einschließungsverfahren für $y^{(n)} = \sum_{i=0}^{n-1} p_i(x)\, y^{(i)} + p(x)$

Für die lineare Differentialgleichung n-ter Ordnung mit polynomialen Koeffizienten wird die Lösung $y(x)$ eines Anfangswertproblems mit einem Potenzreihenansatz dargestellt. Die Abschätzung des Reihenrestes durch eine geometrische Reihe liefert eine Einschließung von y an einer vorgegebenen Stelle h. Durch iterative Defektkorrektur können auf einem Computer enge Einschließungen berechnet werden.

1. Der Einschließungssatz

Es seien $p_i(x) = \sum_{j=0}^{m} b_{ij}\, x^j$, $p(x) = \sum_{j=0}^{m} b_j\, x^j$ Polynome vom Grad $\leq m$ und $y(x)$ Lösung des Anfangswertproblems

$$y^{(n)} = \sum_{i=0}^{n-1} p_i(x)\, y^{(i)} + p(x), \quad y^{(i)}(0) = y_{io}.$$

Der Potenzreihenansatz $y(x) := \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, x^k$ führt für $k > m$ und $h \in I\!R$ auf die Rekursionsformel

$$a_{k+n}\, h^{k+n} \;=\; \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m} \frac{P(k-j,i)\, b_{ij}\, h^{n-i+j}}{P(k,n)}\; a_{k+i-j}\, h^{k+i-j} \tag{1}$$

mit der Hilfsfunktion $P(k,i) := (k+1)\cdots(k+i)$. Die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} a_k h^k$ konvergiert für alle $h \in I\!R$. Wie sich leicht zeigen läßt, ist die Funktion $\frac{P(k-j,i)}{P(k,n)}$ für $0 \leq i \leq n-1,\ 0 \leq j \leq m,\ k \geq nm$ streng monoton fallend in k und es gilt

$$\lim_{k \to \infty} \frac{P(k-j,i)}{P(k,n)} = 0. \tag{2}$$

Setzt man $c_k := a_k \left(\frac{h}{\omega}\right)^k$ mit $\omega \in (0,1)$, so erhält man die Darstellung

$$y(h) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(\frac{h}{\omega}\right)^k \omega^k \;=\; \sum_{k=0}^{k_0-1} a_k\, h^k + \sum_{k=k_0}^{\infty} c_k\, \omega^k$$

mit der Rekursionsformel $(k > m)$

$$c_{k+n} \;=\; \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m} \frac{P(k-j,i)\ b_{ij}\ \left(\frac{h}{\omega}\right)^{n-i+j}}{P(k,n)}\; c_{k+i-j}.$$

Aus der angegebenen Monotonieeigenschaft von $\frac{P(k-j,i)}{P(k,n)}$ und (2) folgt der

Satz: *Es gibt ein $k_0 \geq mn$, so daß die* Wachstumsbedingung

$$\sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m} \frac{P(k-j,i)\, |\, b_{ij}\, |\, \left(\frac{|h|}{\omega}\right)^{n-i+j}}{P(k,n)} \;\leq\; 1 \tag{3}$$

für alle $k \geq k_0$ erfüllt ist, und es gilt dann

$$|\, c_{k_0+j}\, | \;\leq\; \max_{i=-m}^{n-1}\, |\, c_{k_0+i}\, | \;=:\; C \quad \textit{für alle}\ \ j \geq n.$$

Weiter gilt die Abschätzung

$$| \, y(h) - \sum_{k=0}^{k_0-1} a_k \, h^k \, | \quad \leq \quad \frac{C \, \omega^{k_0}}{1-\omega}. \tag{4}$$

2. Implementierung. Beispiele

Der k-te Schritt des Algorithmus zur praktischen Einschließung von $y(h)$ besteht aus mehreren Teilschritten. Zuerst wird $a_k h^k$ mit der Rekursionsformel (1) (bzw. mit einer für $k \leq m$ modifizierten Rekursionsformel) berechnet. Für $k \geq nm$ wird anschließend überprüft, ob die Wachstumsbedingung (3) für ein (fest gewähltes) $\omega \in (0,1)$ erfüllt ist. In diesem Fall wird die im Einschließungssatz angegebene Konstante C berechnet. Falls dann die durch (4) definierte Einschließung von $y(h)$ einer vorgegebenen absoluten Genauigkeitsschranke genügt, wird der Algorithmus beendet, andernfalls mit dem $(k+1)$-ten Schritt fortgesetzt. Da die rechte Seite von (4) für $k_0 \to \infty$ gegen Null strebt, bricht die Iteration bei rundungsfehlerfreier Rechnung nach endlich vielen Schritten ab.

Bei der Berechnung einer verifizierten Einschließung von $y(h)$ auf dem Computer sind alle auftretenden Rundungsfehler zu erfassen. Um für betragsmäßig große Werte von h praktisch verwertbare Einschließungen zu erhalten, werden die $a_k h^k$ im *staggered correction*-Format ([1]) in eine Summe von L Maschinenintervallen eingeschlossen: $a_k \, h^k \in \sum_{l=0}^{L} [d_{k,l}]$. Die $[d_{k,l}]$ werden mittels iterativer Defektkorrektur berechnet:

$$[d_{k+n,0}] := \Big(\sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m} P(k-j,i) \, b_{ij} \, h^{n-i+j} \sum_{l=0}^{L} \; [d_{k+i-j,l}] \Big) \Big/ P(k,n)$$

Für $\mu = 1, \ldots, L$:

$$\begin{aligned} [d_{k+n,\mu-1}] \quad &:= \quad \mathrm{mid}([d_{k+n,\mu-1}]) \\ [d_{k+n,\mu}] \quad &:= \quad \Big(\sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m} P(k-j,i) \, b_{ij} \, h^{n-i+j} \sum_{l=0}^{L} [d_{k+i-j,l}] - P(k,n) \sum_{\nu=0}^{\mu-1} [d_{k+n,\nu}] \Big) \Big/ P(k,n). \end{aligned}$$

Die auftretenden Summen und Produkte sind mit Hilfe eines *genauen Skalarprodukts,* wie es z.B. in PASCAL-XSC zur Verfügung steht, mit einer Rundung auszuwerten. Die bei diesem Vorgehen erzielte mehrfache Genauigkeit kann im Verlauf der Rechnung (durch die Erhöhung von L) an die Anforderungen des gestellten Problems angepaßt werden.

Beispiel 1. $y'' = y, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = -1.$ Exakte Lösung: $y(x) = e^{-x}$.

h	$[y](h)$	L	k_0	Zeit (s)
100	$3.720\,075\,976\,020\,83^{7}_{5}$E-44	7	395	37
200	$1.383\,896\,526\,736\,73^{8}_{7}$E-87	12	748	178

Beispiel 2. $y^{(4)} = (x^2+10x+26)\, y^{(3)} + (-20x-99.5)\, y''$
$+ (x^2+10x+25)\, y' + (-2x^2-4x+29.5)\, y$
$y(0) = 5,\; y'(0) = 4,\; y''(0) = 3,\; y^{(3)}(0) = 2.$
Exakte Lösung: $y(x) = (5-x)\, e^x$.

h	$[y](h)$	L	k_0	Zeit (s)
5	$^{3.150\ldots}_{-3.150\ldots}$ E-063	12	531	67
5	$^{3.039\ldots}_{-3.039\ldots}$ E-095	14	531	77
5	$^{5.387\ldots}_{-5.387\ldots}$ E-159	18	531	110

Die Beispiele wurden in PASCAL-XSC auf einem HP-Vectra-PC (486/66XM) gerechnet.

3. Literatur

1 Stetter, J.: Sequential defect correction for high-accuracy floating-point arithmetic. In: Numerical Analysis (Proceedings, Dundee 1983). Lecture Notes in Mathematics, vol. 1066 (1984), 186–202.

Anschrift: Neher, M., Universität Karlsruhe, Institut für Angewandte Mathematik, D-76128 Karlsruhe