5 Extrapolationsmethode

5.1 Das Extrapolationsprinzip

Zunächst diskutieren wir die allgemeine Idee der sog. „Richardson[1]-Extrapolation zum Limes“. Gegeben sei ein Algorithmus, der für einen Diskretisierungsparameter h, $h \to 0$, numerische Werte $a(h)$ liefert. Gefragt ist nach dem Grenzwert $a(0) = \lim_{h\to 0} a(h)$, der aber i. Allg. nicht direkt berechnet werden kann. Für eine Reihe von Werten $h_0 > h_1 > \ldots > h_k > 0$ sei $a(h_i)$ berechnet. Die Extrapolationsmethode interpoliert dann diese Werte mit Hilfe einer geeigneten (einfach strukturierten) Funktion, etwa einem Polynom $p(h)$, und nimmt den Wert $p(0)$ als Näherung für $a(0)$.

Das beschriebene Vorgehen ist insbesondere sinnvoll, wenn $a(h)$ eine Entwicklung der Form

$$a(h) = a(0) + a_m h^m + a_{m+1} h^{m+1} + O(h^{m+2}) \tag{5.1.1}$$

erlaubt. Haben wir z. B. für eine feste Schrittweite H die Werte $a(H)$ und $a(\tfrac{1}{2}H)$ berechnet, so ist offenbar

$$a(H) = a(0) + a_m H^m + O(H^{m+1}), \quad a(\tfrac{1}{2}H) = a(0) + a_m(\tfrac{1}{2}H)^m + O(H^{m+1}).$$

Interpolieren wir diese Werte mit einem Polynom $p(h) = \alpha_0 + \alpha_m h^m$,

$$p(h) = \frac{2^m a(\frac{1}{2}H) - a(H)}{2^m - 1} + 2^m \frac{a(H) - a(\frac{1}{2}H)}{H^m(2^m - 1)} h^m,$$

so wird wegen der dadurch bewirkten Eliminierung des führenden H^m-Fehlerterms in der Entwicklung (5.1.1):

$$p(0) = \frac{2^m a(\frac{1}{2}H) - a(H)}{2^m - 1} = a(0) + O(H^{m+1}),$$

d. h.: Die Ordnung der Approximation ist von $O(H^m)$ auf $O(H^{m+1})$ erhöht. Der Extrapolationsschritt lässt also zwei äquivalente Interpretationen zu:
- Polynomextrapolation der berechneten Werte $a(H_i)$ nach $H = 0$;
- Elimination der führenden Fehlerterme in der asymptotischen Entwicklung (5.1.1).

Beispiel 5.1: Numerische Differentiation

$$a(h) = h^{-1}[f(t+h) - f(t)] \sim f'(t).$$

Taylorentwicklung um t liefert im Falle $f \in C^4$:

$$\begin{aligned} a(h) &= h^{-1}[f(t) + hf'(t) + \tfrac{1}{2}h^2 f''(t) + \tfrac{1}{6}h^3 f'''(t) + O(h^4) - f(t)] \\ &= f'(t) + \tfrac{1}{2}h f''(t) + \tfrac{1}{6}h^2 f'''(t) + O(h^3). \end{aligned}$$

[1] Lewis Fry Richardson (1881–1953): Englischer Mathematiker und Physiker; wirkte an verschiedenen Institutionen in England und Schottland; typischer „angewandter Mathematiker“; leistete Pionierbeiträge zur Modellierung und Numerik in der Wettervorhersage.

Mit $a(0) = f'(t)$, $a_1 = \frac{1}{2} f''(t)$, $a_2 = \frac{1}{6} f'''(t)$, ist dies eine Entwicklung vom Typ (5.1.1). Mit den Werten $a(H)$, $a(\frac{1}{2}H)$ erhalten wir dann durch

$$p(0) = 2a(\tfrac{1}{2}H) - a(H) = H^{-1}\,[\,4f\,(t+\tfrac{1}{2}H) - 3f\,(t) - f\,(t+H)\,]$$

eine Approximation von $f'(t)$ der Ordnung $O(H^2)$. Für den „symmetrischen“ Differenzenquotienten

$$a(h) = (2h)^{-1}\,[\,f(t+h) - f\,(t-h)\,]$$

gilt im Falle $f \in C^5$:

$$\begin{aligned} a(h) &= (2h)^{-1}\,[\,f(t) + hf'(t) + \tfrac{1}{2}h^2 f''(t) + \tfrac{1}{6}h^3 f'''(t) + \tfrac{1}{24}h^4 f^{(\mathrm{iv})}(t) + O(h^5) \\ &\quad -\ f(t) + hf'(t) - \tfrac{1}{2}h^2 f''(t) + \tfrac{1}{6}h^3 f'''(t) - \tfrac{1}{24}h^4 f^{(\mathrm{iv})}(t) + O(h^5)\,] \\ &= f'(t) + \tfrac{1}{6}h^2 f''(t) + O(h^4)\,, \end{aligned}$$

d. h.: Die Entwicklung von $a(h)$ schreitet mit geraden Potenzen von h fort. In diesem Falle erhalten wir bei Interpolation der Werte $a(H)$ und $a(\frac{1}{2}H)$ durch ein lineares Polynom in h^2,

$$p(h^2) = \tfrac{4}{3}H^{-2}\,[\,a(H) - a(\tfrac{1}{2}H)]\,h^2 + \tfrac{1}{3}\,[\,4a(\tfrac{1}{2}H) - a(H)\,]\,,$$

mit

$$p(0) = \tfrac{4}{3}a(\tfrac{1}{2}H) - \tfrac{1}{3}a(H) = \tfrac{1}{3}H^{-1}\,[\,2f(t+\tfrac{1}{2}H) - 2f(t-\tfrac{1}{2}H) - \tfrac{1}{2}\,f(t+H) + \tfrac{1}{2}\,f(t-H)\,]$$

eine Approximation von $f'(t)$ der Ordnung $O(H^4)$. Dies zeigt, dass die Extrapolation besonders effizient ist, wenn $a(h)$ eine Entwicklung nach geraden Potenzen von h besitzt.

Wir betrachten nun den speziellen Fall einer Entwicklung

$$a(h) = a(0) + a_1h^\gamma + a_2h^{2\gamma} + \ldots + a_mh^{m\gamma} + O(h^{(m+1)\gamma}) \tag{5.1.2}$$

mit einem $\gamma > 0$. Für eine geeignete Folge von Werten $h_0 > h_1 \ldots > h_i > \ldots > 0$ seien die Werte $a(h_i)$ berechnet. Dann bezeichne $T_{ik}(h)$ das (eindeutig bestimmte) Polynom k-ten Grades in h^γ, welches die $k+1$ Werte $a(h_{i+j}),\ j = 0, \ldots, k$, interpoliert:

$$T_{ik}(h) = b_0 + b_1h^\gamma + \ldots + b_kh^{k\gamma}\,, \quad T_{ik}(h_{i+j}) = a(h_{i+j})\,, \quad j = 0, \ldots, k\,.$$

Den Wert $T_{ik} := T_{ik}(0) = b_0$ nehmen wir als Näherung für $a(0)$. Zur Abschätzung des Fehlers $T_{ik} - a(0)$ setzen wir $z = h^\gamma$, so dass

$$T_{ik}(h) = b_0 + b_1z + \ldots + b_k\,z^k\,.$$

In der Lagrange-Darstellung hat $T_{ik}(h)$ die Form

$$T_{ik}(h) = \sum_{j=0}^{k} L_{ij}^{(k)}(z)\,a(h_{i+j}), \quad L_{ij}^{(k)}(z) = \prod_{l\neq j, l=0}^{k} \frac{z - z_{i+l}}{z_{i+j} - z_{i+l}}. \tag{5.1.3}$$

Folglich ist

$$T_{ik} = \sum_{j=0}^{k} L_{ij}^{(k)}\,a(h_{i+j})\,, \quad L_{ij}^{(k)} = (-1)^k \prod_{l\neq j, l=0}^{k} \frac{z_{i+l}}{z_{i+j} - z_{i+l}} = (-1)^k \prod_{l\neq j, l=0}^{k} \frac{1}{\frac{z_{i+j}}{z_{i+l}} - 1}\,. \tag{5.1.4}$$

Hilfssatz 5.1 (Lagrange-Polynome): *Es gilt*

$$\sum_{j=0}^{k} z_{i+j}^{\tau}\, L_{ij}^{(k)} = \begin{cases} 1 & , \text{ für } \tau = 0 \\ 0 & , \text{ für } \tau = 1, \dots, k \\ (-1)^k z_i z_{i+1} \dots z_{i+k} & , \text{ für } \tau = k+1 \end{cases} . \tag{5.1.5}$$

Beweis: Für $\tau = 0, \dots, k$ folgt die Behauptung aus der Eindeutigkeit der Lagrange-Polynominterpolation. Für das Polynom $p(z) = z^{k+1}$ gilt

$$z^{k+1} = \sum_{j=0}^{k} z_{i+j}^{k+1} \prod_{l \neq j, l=0}^{k} \frac{z - z_{i+l}}{z_{i+j} - z_{i+l}} + \prod_{l=0}^{k} (z - z_{i+l}) \,,$$

denn die rechte Seite ist gleich der linken für $z = z_{i+r}$, $r = 0, \dots, k$, und die Koeffizienten von z^{k+1} stimmen überein. Daraus folgt

$$\sum_{j=0}^{k} z_{i+j}^{k+1}\, L_{ij}^{(k)} = (-1)^k\, z_i z_{i+1} \dots z_{i+k} \,,$$

was zu beweisen war. Q.E.D.

Damit erhalten wir folgendes Resultat.

Satz 5.1 (Allgemeiner Extrapolationssatz): *Unter der Voraussetzung*

$$\sup_{i \geq 0} \frac{h_{i+1}}{h_i} < 1 \tag{5.1.6}$$

gilt für festes k *und* $i \to \infty$ *:*

$$T_{ik} - a(0) = O(h_i^{(k+1)\gamma}) \,, \tag{5.1.7}$$

d. h.: Die Elemente der k-ten Spalte des Extrapolationstableaus konvergieren gegen $a(0)$ *wie* $O(h_i^{(k+1)\gamma})$ *.*

Beweis: Unter Verwendung von (5.1.2) und (5.1.5) finden wir

$$T_{ik} = \sum_{j=0}^{k} L_{ij}^{(k)}\, a(h_{i+j}) = \sum_{j=0}^{k} L_{ij}^{(k)} \left[\, a_0 + a_1 z_{i+j} + \dots + a_k z_{i+j}^{k} + z_{i+j}^{k+1}\, (a_{k+1} + O(h_{i+j}^{\gamma})) \right]$$

und folglich

$$\begin{aligned} T_{ik} &= a(0) + (-1)^k\, z_i \cdot \ldots \cdot z_{i+k}\, (a_{k+1} + O(h_i^{\gamma})) \\ &= a(0) + \underbrace{z_i \cdot \ldots \cdot z_{i+k}}_{>0} \sigma_{k+1}\, (h_i, \dots, h_{i+k}), \end{aligned} \tag{5.1.8}$$

wobei

$$z_i \cdot \ldots \cdot z_{i+k} = O(h_i^{(k+1)\gamma}), \qquad \sigma_{k+1}(h_i, \ldots, h_{i+k}) = (-1)^k (a_{k+1} + O(h_i^\gamma)) .$$

Dies impliziert die Behauptung. Wir bemerken, dass im Falle $h_{i+1}/h_i \to 1$, die Koeffizienten $L_{ij}^{(k)}$ in den extrapolierten Werten $T_{ik}(h)$ unbeschränkt anwachsen. Q.E.D.

Der Fehlerdarstellung (5.1.8) entnehmen wir, dass für festes k, und $a_{k+1} \neq 0$, T_{ik} und für $i \to \infty$ einseitig entweder von oben oder von unten gegen $a(0)$ konvergiert. Mit den Größen

$$U_{ik} := 2\, T_{i+1,k} - T_{ik}$$

gilt dann weiter

$$\begin{aligned} U_{ik} - a(0) &= 2\,[\, T_{i+1,k} - a(0)\,] - [\, T_{i,k} - a(0)\,] \\ &= 2\, z_{i+1} \cdot z_{i+2} \cdot \ldots \cdot z_{i+1+k}\, \sigma_{k+1}(h_{i+1}, \ldots, h_{i+1+k}) \\ &- z_i \cdot z_{i+1} \cdot \ldots \cdot z_{i+k}\, \sigma_{k+1}(h_i, \ldots, h_{i+k}) \\ &= z_i \cdot \ldots \cdot z_{i+k} \,[\, -\sigma_{k+1}(h_i, \ldots, h_{i+k}) + \frac{2 z_{i+1+k}}{z_i}\, \sigma_{k+1}(h_{i+1}, \ldots, h_{i+1+k})\,]. \end{aligned} \tag{5.1.9}$$

Nun ist

$$\lim_{i\to\infty} \sigma_{k+1}(h_i, \ldots, h_{i+k}) = \lim_{i\to\infty} \sigma_{k+1}(h_{i+1}, \ldots, h_{i+1+k}) = (-1)^k\, a_{k+1}$$

und (in der Regel)

$$\left| \frac{2 z_{i+1+k}}{z_i} \right| = \left| \frac{2 h_{i+1+k}^\gamma}{h_i^\gamma} \right| \ll 1 .$$

Ein Vergleich von (5.1.8) und (5.1.9) zeigt, daß für festes k und genügend großes i gilt:

$$T_{ik} - a(0) \sim -(U_{ik} - a(0)) , \tag{5.1.10}$$

d. h.: Es ist näherungsweise (wegen der einseitigen Konvergenz $T_{ik} \to a(0)$)

$$T_{ik} < a(0) < U_{ik} \quad \text{oder} \quad U_{ik} < a(0) < T_{ik} , \tag{5.1.11}$$

und beide Seiten konvergieren gegen $a(0)$ für $i \to \infty$. Dieses Verhalten der Folgen $(T_{ik})_{i\in\mathbb{N}}, (U_{ik})_{i\in\mathbb{N}}$ kann zur Konstruktion eines Abbruchkriteriums verwendet werden:

$$|T_{ik} - U_{ik}| \le TOL \quad \Rightarrow \quad \text{STOP}. \tag{5.1.12}$$

Unter den Bedingungen

$$\inf_{i\ge 0} \frac{h_{i+1}}{h_i} > 0 , \quad \sup_{i\ge 0} \frac{h_{i+1}}{h_i} < 1 , \tag{5.1.13}$$

lässt sich sogar zeigen, dass die Diagonalfolge $(T_{ii})_{i\in\mathbb{N}}$ schneller gegen $a(0)$ konvergiert („superlineare" Konvergenz) als jede der Folgen $(T_{ik})_{i\in\mathbb{N}}$ für festes k.

Zur Berechnung der Werte T_{ik} des Extrapolationstableaus ist es natürlich nicht sinnvoll, dazu explizit die Koeffizienten der Polynome $T_{ik}(h)$ zu bestimmen. Stattdessen werden die T_{ik} rekursiv berechnet, ohne den Umweg über die Polynome $T_{ik}(h)$. Dazu beachtet man, dass das lineare Polynom $T_{i1}(z)$ welches die Werte $a(h_i)$, $a(h_{i+1})$ interpoliert, gegeben ist in der Determinantenform

$$T_{i1}(z) = \frac{1}{z_{i+1} - z_i} \begin{vmatrix} a(h_i) & z_i - z \\ a(h_{i+1}) & z_{i+1} - z \end{vmatrix}, \quad z = h^\gamma .$$

Im nächsten Schritt schreibt man das Polynom $T_{i2}(z)$, welches die Werte $a(h_i)$, $a(h_{i+1})$, $a(h_{i+2})$ interpoliert, in der Form

$$T_{i2}(z) = \frac{1}{z_{i+2} - z_i} \begin{vmatrix} T_{i,1}(z) & z_i - z \\ T_{i+1,1}(z) & z_{i+2} - z \end{vmatrix} .$$

Durch vollständige Induktion findet man dann, dass das Polynom $T_{ik}(z)$, welches die Werte $a(h_i), \dots, a(h_{i+k})$ interpoliert, sich aus den vorausgehenden $T_{i,k-1}(z)$ rekursiv aufbaut als

$$T_{i,k}(z) = \frac{1}{z_{i+k} - z_i} \begin{vmatrix} T_{i,k-1}(z) & z_i - z \\ T_{i+1,k-1}(z) & z_{i+k} - z \end{vmatrix} . \tag{5.1.14}$$

Damit erhalten wir für die Werte T_{ik} die folgenden Rekursionsformeln:

$$T_{i0} = a(h_i) , \quad T_{ik} = \frac{1}{z_{i+k} - z_i} \begin{vmatrix} T_{i,k-1} & z_i \\ T_{i+1,k-1} & z_{i+k} \end{vmatrix} . \tag{5.1.15}$$

Für praktische Auswertung geeigneter ist die Form

$$T_{ik} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{(h_{i-k}/h_i)^\gamma - 1} , \tag{5.1.16}$$

bei der nicht durch die möglicherweise kleinen Größen $h_{i+k} - h_i$ dividiert wird. Dies ist gerade der Neville-Algorithmus zur Auswertung des Lagrange-Interpolationspolynoms. Die Werte T_{ik} werden üblicherweise in einem sog. „Extrapolationstableau“ angeordnet:

$$\begin{array}{c|ccccccccc}
h_0 & T_{00} & & & & & & & & \\
 & & \searrow & & & & & & & \\
h_1 & T_{10} & \to & T_{11} & & & & & & \\
 & & \searrow & & \searrow & & & & & \\
h_2 & T_{20} & \to & T_{21} & \to & T_{22} & & & & \\
\vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & & & \\
h_i & T_{i0} & \to & T_{i1} & \to & T_{i2} & \cdots & T_{ii} & & \\
\vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots &
\end{array} \qquad T_{i0} = a(h_i) .$$

5.2 Anwendung auf gewöhnliche Differentialgleichungen

Zur Anwendung der Extrapolationsmethode auf die numerische Lösung einer AWA müssen wir zunächst sicherstellen, dass der globale Diskretisierungsfehler $e_n = u(t_n) - y_n$ eine Entwicklung der Art (5.1.2) erlaubt. Wir betrachten wieder die Anfangswertaufgabe

$$u'(t) = f(t, u(t)), \quad t \in I = [t_0, t_0 + T], \quad u(t_0) = u^0. \tag{5.2.17}$$

Satz 5.2 (Allgemeine Fehlerentwicklung): *Die Funktion $f(t,x)$ sei $(N+1)$-mal stetig differenzierbar auf $I \times \mathbb{R}^d$. Dann gilt für die durch ein (Lipschitz-stetiges) Einschrittverfahren der Ordnung $m \geq 1$ für äquidistante Schrittweite h gelieferte Näherungslösung y_n, $y_0 = u_0$, die asymptotische Entwicklung*

$$y_n = u(t_n) + h^m e_m(t_n) + \ldots + h^N e_N(t_n) + h^{N+1} E_{N+1}(t_n; h), \tag{5.2.18}$$

wobei die Funktionen $e_i(t)$ unabhängig von h sind, und das Restglied $E_{N+1}(t_n; h)$ beschränkt ist.

Beweis: Wir geben den Beweis nur exemplarisch für die Polygonzugmethode und den Fall $N = 1$, $d = 1$. Für die Lösung $u \in C^3(I)$ gilt dann mit einem Zwischenwert $\xi_n \in (t_n, t_{n+1})$:

$$u(t_{n+1}) = u(t_n) + h\, f(t_n, u(t_n)) + \tfrac{1}{2}h^2 u''(t_n) + \tfrac{1}{6}h^3\, u'''(\xi_n).$$

Für den Fehler $e_n = y_n - u(t_n)$ folgt also

$$\begin{aligned} e_{n+1} &= e_n + h\{f(t_n, y_n) - f(t_n, u(t_n))\} - \tfrac{1}{2}h^2 u''(t_n) - \tfrac{1}{6}h^3 u'''(\xi_n) \\ &= e_n + h f'_x(t_n, u(t_n))\, e_n + \tfrac{1}{2}h f''_{xx}(t_n, \eta_n)\, e_n^2 - \\ &\quad - \tfrac{1}{2}h^2 u''(t_n) - \tfrac{1}{6}h^3 u'''(\xi_n), \quad \eta_n \in (u(t_n), y_n). \end{aligned}$$

Die Funktion $\bar{e}_n := \frac{1}{h} e_n$ genügt dann offensichtlich der Differenzengleichung

$$\bar{e}_{n+1} = \bar{e}_n + h\{f'_x(t_n, u(t_n))\bar{e}_n - \tfrac{1}{2}u''(t_n)\} + h^2 r_n \tag{5.2.19}$$

mit

$$r_n = \tfrac{1}{2} f''_{xx}(t_n, \eta_n)\, \bar{e}_n^2 - \tfrac{1}{6} u'''(\xi_n).$$

Der Konvergenzsatz 2.2 liefert die Abschätzung

$$|e_n| \leq e^{L(t_n - t_0)}\, h \sum_{\nu=1}^{n} |\tau_\nu^h| \leq \tfrac{1}{2} e^{LT}\, T\, h \max_{t \in I} |u''(t)| =: K_1 h,$$

und damit

$$|r_n| \leq \tfrac{1}{2} \max_{(t,x) \in I \times \mathbb{R}} |f''_{xx}(t,x)|\, K_1^2 + \tfrac{1}{6} \max_{t \in I} |u'''(t)| =: K_2.$$

Die Beziehung (5.2.19) kann nun als die Anwendung der Polygonzugmethode auf die lineare AWA

$$e'(t) = f_x(t, u(t)) e(t) - \tfrac{1}{2} u''(t), \quad t \in I, \quad e(t_0) = 0, \tag{5.2.20}$$

interpretiert werden, wobei in jedem Schritt noch ein zusätzlicher Fehler $h^2 r_n$ gemacht wird. Die Fehlerabschätzung aus Satz 2.2 besagen dann, dass

$$|\bar{e}_n - e(t_n)| \le e^{L(t_n - t_0)} \Big\{ \sum_{\nu=1}^{n} h|\tilde{\tau}_\nu^h| + \sum_{\nu=1}^{n} h^2 |r_\nu| \Big\} \le K_3 h, \tag{5.2.21}$$

mit dem zur AWA (5.2.20) gehörenden Abschneidefehler $\tilde{\tau}_\nu^h$. Also ist

$$e_n = h\, e(t_n) + h^2 E_2(t_n; h)\,, \quad |E_2(t_n; h)| \le K_3,$$

was zu beweisen war. Q.E.D.

Dieses Resultat besagt, dass alle hier betrachteten Einschrittverfahren für die Extrapolation in Frage kommen, z. B. das explizite Euler-Verfahren

$$y_n = y_{n-1} + hf(t_{n-1}, y_{n-1}),$$

sein implizites Gegenstück

$$y_n = y_{n-1} + hf(t_n, y_n),$$

oder die Trapezregel

$$y_n = y_{n-1} + \tfrac{1}{2} h \,(f(t_n, y_n) + f(t_{n-1}, y_{n-1})).$$

Ersteres entspricht dem oben behandelten Beispiel des vorwärtsgenommenen Differenzenquotienten zur Approximation der Ableitung.

Satz 5.2 fordert die Verwendung einer äquidistanten Schrittweite bei der Erzeugung der Näherungswerte y_n, was eine adaptive Schrittweitenwahl ausschließt. Damit wird diese (zeitlich) „globale“ Extrapolation zur Verminderung des „globalen“ Diskretisierungsfehlers, bei der in jedem Schritt über das ganze Zeitintervall $[t_0, t_0 + T]$ gerechnet werden muss, für die Praxis unattraktiv. Stattdessen verwendet man „lokale“ Extrapolation in jedem einzelnen Zeitschritt $y_n \to y_{n+1}$ zur Erhöhung der „lokalen“ Approximationsordnung (Konsistenzordnung), d. h. zur Erzeugung einer Differenzenapproximation höherer Ordnung.

Bei der Wahl einer geeigneten „Basisformel“ für die Anwendung der Extrapolation sollten die folgenden Kriterien beachtet werden:

– Die Formel sollte möglichst „einfach“ sein, d. h. nur eine Funktionsauswertung pro Zeitschritt erfordern, denn die Konsistenzordnung kann ja durch Fortschreiten nach rechts im Extrapolationstableau beliebig erhöht werden. Damit kommen praktisch nur die obige explizite oder die implizite Euler-Formel, die Trapezregel oder die Mittelpunktsregel

  $$y_n = y_{n-2} + 2hf(t_{n-1}, y_{n-1})$$

  in Frage. Letztere ist allerdings eine Zweischrittformel, auf die Satz 5.2 nicht anwendbar ist.

– Da wir hier nur nicht-steife AWA betrachten, kommen „implizite“ Formel aus Aufwandsgründen nicht in Frage. Damit scheiden die implizite Euler-Formel und die Trapezregel aus.

– Aus Effizienzgründen ist es wünschenswert, eine Basisformel zu verwenden, die eine asymptotische Fehlerentwicklung nach h^2-Potenzen zulässt. In Analogie zur numerischen Quadratur ist dies, wegen der symmetrischen Positionierung der Funktionsauswertungen im Integrationsintervall $[t_{n-1}, t_n]$ bzw. $[t_{n-2}, t_n]$, für die Trapezregel und die Mittelpunktsregel zu erwarten.

Bei Anlegung dieser drei Auswahlkriterien kommt also für die Anwendung der (lokalen) Extrapolation bei nicht-steifen AWA als Basisformel praktisch nur die Mittelpunktsregel in Frage. Diese erfordert als Zweischrittformel (2. Ordnung) eine geeignete Startprozedur (mindestens 1. Ordnung). Für die Mittelpunktsregel gilt das folgende Resultat von Gragg[2](1963):

Satz 5.3 (Satz von Gragg): *Die Funktion $f(t,x)$ sei $(2m+2)$-mal stetig differenzierbar auf $I \times \mathbb{R}^d$, und es sei y_n die durch die Mittelpunktsregel mit expliziter Euler-Formel als Startprozedur gelieferte Näherungslösung. Dann besteht die asymptotische Entwicklung*

$$y_n = u(t_n) + \sum_{k=1}^{m} h^{2k}\{a_k(t_n) + (-1)^n b_k(t_n)\} + h^{2m+2} E_{2m+2}(t_n; h)\,, \tag{5.2.22}$$

wobei die Funktionen $a_k(t)$, $b_k(t)$ unabhängig von h sind, und das Restglied $E_{2m+2}(t;h)$ beschränkt ist.

Wegen des oszillierenden Terms $(-1)^n b_k(t_n)$ ist (5.2.22) nicht ganz eine Entwicklung der gewünschten Form (5.1.2). Die Verwendung der expliziten Euler-Formel als Startprozedur ist wesentlich; wird stattdessen etwa die Runge-Kutta-Formel 4. Ordnung genommen, so besteht nur noch eine Entwicklung der Form

$$y_n = u(t_n) + \sum_{k=2}^{2m+1} h^k\{\tilde{a}_k(t_n) + (-1)^n \tilde{b}_k(t_n)\} + h^{2m+2} \tilde{E}_{2m+2}(t_n; h)\,.$$

Der oszillierende Term $(-1)^n\, b_1(t_n)$ im führenden Fehlerglied

$$y_n - u(t_n) = h^2\,[a_1(t_n) + (-1)^n\, b_1(t_n)] + O(h^4)$$

kann durch einen Trick beseitigt werden. Man bildet den Mittelwert

$$\tilde{y}_n = \tfrac{1}{4}\, y_{n+1} + \tfrac{1}{2}\, y_n + \tfrac{1}{4}\, y_{n-1}\,, \tag{5.2.23}$$

[2]William B. Gragg (1936–2016): US-Amerikanischer angewandter Mathematiker; Professor an der Naval Postgraduate School (Monterey, Californien); Schüler von P. Henrici; wichtige Beiträge zur numerischen linearen Algebra und zur Numerik von gew. Differentialgleichungen; das nach ihm benannte Extrapolationsverfahren war Gegenstand siner Dissertation 1964 an der University of California (UCLA, USA).

welcher die Entwicklung besitzt:

$$\begin{aligned}\tilde{y}_n = \tfrac{1}{2}\Big\{ & u(t_n) + \tfrac{1}{2}\{u(t_{n+1}) + u(t_{n-1})\} + \\ & + \sum_{k=1}^{m} h^{2k}\left[a_k(t_n) + \tfrac{1}{2}\{a_k(t_{n+1}) + a_k(t_{n-1})\} + \right. \\ & \left. + (-1)^n \{ b_k(t_n) - \tfrac{1}{2}\{b_k(t_{n+1}) + b_k(t_{n-1})\}\right] \Big\} + O(h^{2m+2}) .\end{aligned}$$

Entwickelt man $u(t_{n\pm1})$ und $a_k(t_{n\pm1})$, $b_k(t_{n\pm1})$ in Taylor-Reihen nach h, so erhält man eine Entwicklung der Form

$$\begin{aligned}\tilde{y}_n = u(t_n) + h^2 [\, a_1(t_n) + \tfrac{1}{2}\, u^{(2)}(t_n)\,] + \\ + \sum_{k=2}^{m} h^{2k} [\, \tilde{a}_k(t_n) + (-1)^n \tilde{b}_k(t_n)\,] + O(h^{2m+2}) ,\end{aligned} \tag{5.2.24}$$

deren führender Term kein Oszillationsglied mehr enthält.

Das Extrapolationsverfahren basierend auf der Mittelpunktregel kombiniert mit der Mittelung (5.2.23) ist eine der meist gebräuchlichen Methoden dieser Art. Aufgrund der Oszillationsterme in den Entwicklungen (5.2.22) und (5.2.24) muss man darauf achten, dass die Schrittweitenfolge

$$h_i = \frac{H}{n_i}, \quad 1 \le n_0 < n_1 < n_2 < \dots$$

nur mit geraden n_i oder nur mit ungeraden n_i gebildet wird, damit $(-1)^n$ stets von ein und demselben Vorzeichen ist. Eine populäre Folge ist (sog. „Bulirsch[3]-Folge“)

$$\{2, 4, 6, 8, 12, 16, \dots\} ,$$

wobei man gewöhnlich nicht mehr als 6-8 Extrapolationsschritte ausführt. Die ebenfalls geeignete „Romberg-Folge“ $\{2, 4, 8, 16, \dots\}$ ist wegen der sehr schnell kleiner werdenden Schrittweiten meist zu aufwendig, während die Folge $\{1, 2, 3, 4, \dots\}$ wegen $h_i/h_{i+1} \to 1\,(i \to \infty)$ ein instabiles Verhalten der T_{ik} bewirkt.

Basierend auf Satz 5.3 sieht das Extrapolationsverfahren nach Gragg-Stoer[4]-Bulirsch wie folgt aus:

[3]Roland Bulirsch (1932–): Deutscher Numeriker; 1967–1969 Assoc. Prof. an der University of California in San Diego, USA, 1969 Prof. an der Univ. Köln und ab 1973 Prof. an der TU München; Beiträge vor allem zur Numerik von gew. Differentialgleichungen und Optimierungsaufgaben; besonders bekannt durch die von ihm entwickelte „Mehrzielmethode (Mehrfachschießverfahren)“ und sein Lehrbuch „Numerische Mathematik“ zus. mit J. Stoer.

[4]Josef Stoer (1934–): Deutscher Numeriker; Professor an der Univ. Würzburg; Beiträge zur Approximationstheorie, Numerik gew. Differentialgleichungen und Optimierungsverfahren; bekannt durch sein Lehrbuch „Numerische Mathematik zus. mit R. Bulirsch“ basierend auf Vorlesungen seines Doktorvaters Friedrich L. Bauer (Univ. Mainz).

(i) Wähle eine „Grundschrittweite“ H zur Berechnung der Näherungen

$$y_n \approx u(t_n) \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

(ii) Sei y_n berechnet. Wähle ganze Zahlen $n_0 < n_1 < \dots < n_m$ und berechne die Näherungen

$$\eta(t_n + \nu h_i; h_i)\,, \quad h_i = H/n_i\,, \quad \nu = 1, \dots, n_i + 1\,,$$

mit Hilfe der Mittelpunktregel gestartet durch die Polygonzgmethode,

$$\begin{aligned} \eta(t_n + h_i; h_i) &= y_n + h_i\, f(t_n, y_n) \\ \eta(t_n + (\nu+1)h_i; h_i) &= \eta(t_n + (\nu-1)h_i; h_i) + 2h_i\, f(t_n + \nu h_i, \eta(t_n + \nu h_i; h_i)), \end{aligned}$$

und setze

$$a(h_i) = \tilde{\eta}(t_{n+1}; h_i) = \frac{1}{4}\big\{\eta(t_{n+1} - h_i; h_i) + 2\eta(t_{n+1}; h_i) + \eta(t_{n+1} + h_i; h_i)\big\}.$$

(iii) Berechne die diagonalen Werte T_{ii} des Extrapolationstableaus mit Hilfe der Rekursionsformel (5.1.16). Setze $y_{n+1} := T_{mm}$, und beginne wieder bei (ii).

Durch Berechnung der Werte

$$U_{mm} := 2T_{m+1,m} - T_{mm}$$

lassen sich Schätzungen für den lokalen Fehler $T_{mm} - u(t_{n+1})$ und damit für den Abschneidefehler gewinnen:

$$|\tau_n| \sim H^{-1}|T_{mm} - U_{mm}|\,. \tag{5.2.25}$$

Das Graggsche Extrapolationsverfahren lässt sich offensichtlich als ein explizites Einschrittverfahren zur Basisschrittweite H auffassen. Seine lokale Genauigkeit (bei exaktem Startwert y_n) ist nach Satz 5.1 gerade $O(H^{2m+2})$, d. h.: Die Konsistenzordnung ist $2m + 2$. Bei Verwendung der Folge $\{2, 4, 6, 8, 12, 16\}\,(m = 5)$ erhält man also ein Verfahren der Ordnung 12.

Neben der Polynomextrapolation findet auch die Extrapolation mit rationalen Funktionen Verwendung. In der Tat sind die erzielten Ergebnise bei Verwendung rationaler Funktionen

$$T_{ik}(h) = \frac{P_{ik}(h)}{Q_{ik}(h)}\,,$$

welche die Werte $a(h_i), \dots, a(h_{i+k})$ interpolieren, oft wesentlich besser als die durch Polynominterpolation erzielten. Für die Werte $T_{ik} = T_{ik}(0)$ des zugehörigen Extrapolationstableaus bestehen dann ähnliche Rekursionsformeln wie die oben angegebenen.

Die Anwendung der Extrapolationsmethode auf steife AWAn erfordert die Verwendung einer A-stabilen Basisformel. Hierfür kommen in Betracht die einfache implizierte Euler-Formel oder die Trapezregel, welche wieder eine asymptotische Fehlerentwicklung in h^2 erlaubt. Allerdings neigt die Trapezregel zu Instabilitäten gegenüber Störungen der Daten, so dass in der Praxis die robustere implizierte Euler-Formel vorgezogen wird.

5.2.1 Numerischer Test

Für die AWA

$$u'(t) = -200t\,u(t)^2\,, \quad t \geq -3, \qquad u(-3) = 1/901\,,$$

mit der Lösung $u(t) = (1+100t^2)^{-1}$ wurde der Wert $u(0) = 1$ mit dem Graggschen Extrapolationsverfahren approximiert: $(i = 0,\dots,m)$

$$\begin{aligned} \eta(t_n + h_i; h_i) &= y_n + h_i f(t_n, y_n) \\ \eta(t_n + (\nu+1)h_i; h_i) &= \eta(t_n + (\nu-1)h_i; h_i) + 2h_i f(t_n + \nu h_i, \eta(t_n + \nu h_i, h_i)) \\ &\quad (\nu = 1,\dots,n_i+1) \\ a(h_i) &= \frac{1}{4}\left\{\eta(t_{n+1} - h_i; h_i) + 2\eta(t_{n+1}; h_i) + \eta(t_{n+1} + h_i; h_i)\right\} \end{aligned}$$

und weiter

$$T_{i0} := a(h_i)\,, \quad T_{ik} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{(h_i/h_{i+k})^2 - 1}\,,$$

$$(i = 0,\dots,m+1;\ k = 1,\dots,m)$$

$$y_{n+1} = T_{mm}\,, \quad U_{mm} = 2T_{m+1,m} - T_{mm}.$$

Die Schrittweitensteuerung erfolgte dabei gemäß dem Kriterium

$$H^{-1}\,|T_{mm} - U_{mm}| \sim \varepsilon = \text{eps}\,|y_n|/H\,.$$

Bei Verwendung der Bulirsch-Folge $\{H/2, H/4, H/6, H/8\}$ mit $H = 0.1$ ergaben sich mit 17-stelliger Rechnung die folgenden Resultate:

Ordnung	eps	$h_{\min}$	$h_{\max}$	Fehler	Auswertungen
$m = 10$	10^{-13}	$6 \cdot 10^{-3}$	0.1	$2 \cdot 10^{-12}$	~ 7.800
Rechnung mit konstanter (mittlerer) Schrittweite:					
		$2.5 \cdot 10^{-2}$		$6 \cdot 10^{-12}$	~ 4.400

Der durch die adaptive Schrittweitenwahl bedingte Mehraufwand an Funktionsauswertungen garantiert die Einhaltung der Fehlerschranke eps $\sim 10^{-12}$ ohne a priori-Kenntnis der „optimalen" gleichmäßigen Schrittweite $h = 2.5 \cdot 10^{-2}$.

5.3 Übungsaufgaben

Aufgabe 5.1: Für die AWA

$$u'(t) = f(t, u(t)), \quad t \geq 0, \quad u(0) = u_0,$$

soll näherungsweise der Lösungswert $u(1)$ mit Hilfe des Graggschen Extrapolationsverfahrens zur Basisschrittweite h unter Verwendung der sog. „Bulirsch-Folge“ $\{2,4,6,8,12,16\}$ berechnet werden.

a) Man beschreibe den Ablauf dieses Verfahrens. Welche Ordnung hat es, wenn die ganze gegebene Schrittweitenfolge verwnedet wird?

b) Wieviele Funktionsauswertungen sind in Abhängigkeit von h erforderlich?

Aufgabe 5.2: Die Anwendung der Extrapolationsmethode im Falle steifer AWAn erfordert die Verwendung eines einfachern A-stabilen Basisverfahrens, z. B. das implizite Euler-Verfahren (oder die Trapezregel):

$$y_n = y_{n-1} + h_n f(t_n, y_n), \quad n \geq 1, \quad y_0 = u_0.$$

a) Man beschreibe den Ablauf des Extrapolationsverfahrens mit der impliziten Euler-Formel als Basisverfahren. Welche Ordnung hat es, wenn die ganze „Bulirsch-Folge“ $\{2,4,6,8,12,16\}$ verwendet wird?

b) Es stellt sich die Frage, ob das resultierende Extrapolationsverfahren ebenso wie das zugrunde liegende Basisverfahren wieder A-stabil ist. Man diskutiere diese Frage exemplarisch durch Betrachten eines Zeitschrittes des Extrapolationsverfahrens mit genau einem Extrapolationsschritt ($m = 1$):
Wie sieht der Verstärkungsfaktor $\omega(z)$ aus? Was kann man über sein Verhalten auf der reellen Achse aussagen; und in der Umgebung von 0 in der komplexen Ebene?

(*Bemerkung:* Die Trapezregel neigt beim Extrapolieren leicht zu numerisch instabilem Verhalten und erfordert daher in der Praxis, ähnlich wie die Mittelpunktsregel, die Zwischenschaltung einer zusätzliche Mittellungsprozedur zur Stabilisierung.)

Aufgabe 5.3: Man schreibe die modifizierte Mittelpunktsformel nach Gragg (mit einem expliziten Euler-Schritt als Startprozedur) zur Schrittweite h/N mit $N = 2$ als Runge-Kutta-Methode zur Schrittweite h.

a) Welche Ordnung hat diese Formel?

b) Die Mittelpunktsformel hat ein triviales Stabilitätsintervall. Man verifiziere, dass diese Runge-Kutta-Methode trotzdem das ungefähre Stabilitätsintervall $\mathrm{SI} = [-3.1, 0]$ besitzt. Dies demonstriert den Stabilisierungseffekt der Graggschen Glättungsoperation.

Aufgabe 5.4 (Praktische Aufgabe): Man realisiere das Graggsche Extrapolationsverfahren für die AWA

$$u'(t) = -200\, t\, u(t)^2, \quad t \geq -3, \quad u(-3) = \frac{1}{901},$$

mit der exakten Lösung

$$u(t) = \frac{1}{1 + 100t^2}$$

auf dem Intervall $I = [-3, 1]$. Für die Basisschrittweiten $h = 2^{-k}, k = 3, 4, 5, 6$, überprüfe man die durch die Theorie vorhergesagten Konvergenzordnungen für $R = 1, 2, \dots, 6$ Extrapolationsschritte. Die Schrittweiten seien dabei ausgehend von der Basisschrittweite h gemäß der „Bulirsch-Folge“

$$\{h/n_i\}_{i=1,\dots,6}, \quad n_i \in \{2, 4, 6, 8, 12, 16\},$$

gewählt.