Greggsche Extrapolationsmethode von Differentialgleichungen

Fabian Schmidtchen, 227 240

1 Extrapolation

1.1 Beispiel (Tangenshyperbolikus mittels rechtsseitigem Differenzenquotienten):
Wir betrachten die Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = \tanh(x)$. Davon soll nun numerisch die Ableitung an der Stelle $x = 1$ bestimmt werden, siehe Abb. (1). Eine Möglichkeit der Berechnung läuft über den rechtsseitigen Differenzenquotienten:

$$f'(1) \approx \frac{\tanh(1+h) - \tanh(1)}{h}$$

wobei h klein gewählt wird.

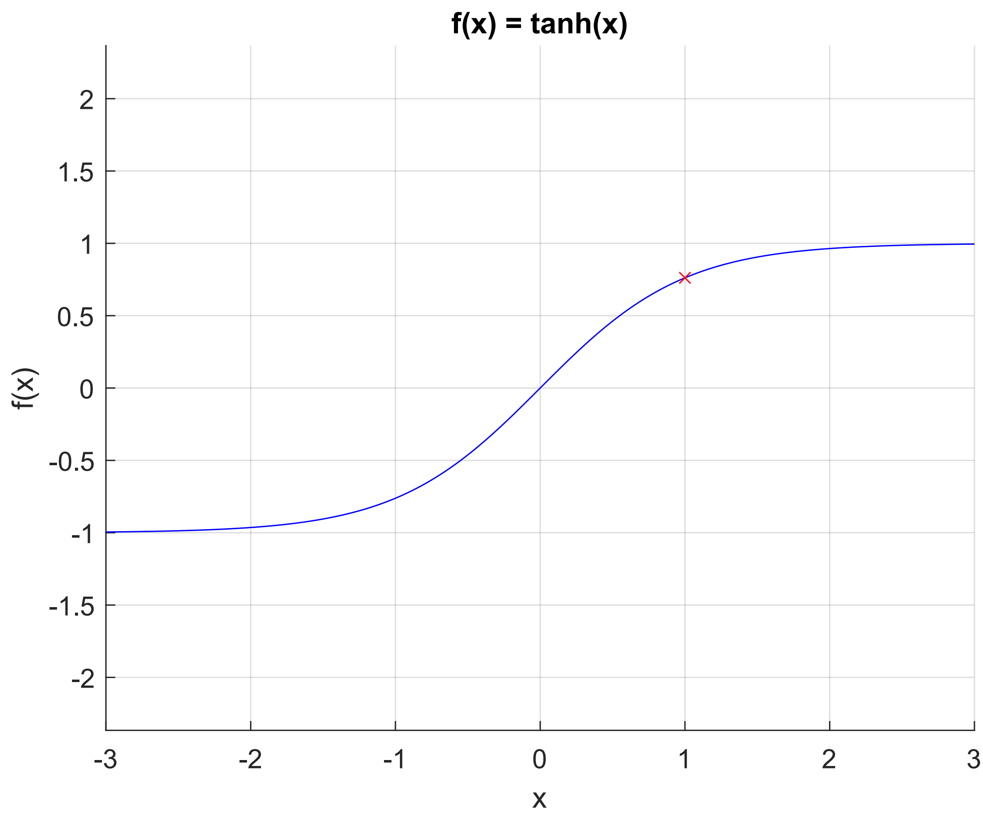

Abbildung 1: Tangenshyperbolikus

1.2 Idee (Idee der Extrapolation):
Wähle verschiedene Schnrittweiten h_i und extrapoliere zwischen den Schrittweiten h_i bis zur Stelle $h = 0$.

1.3 Beispiel (Tangenshyperbolikus mittels rechtsseitigem Differenzenquotienten):

Wähle die zu interpolierende Funktion

$$a(h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Interpoliere diese zu $a(h = 0)$. Um den Nutzen, also die entsprechende Fehlerordnung dieses Verfahrens zu bestimmen, wird die Funktion $f(x_0)$ bei $f(x_0 + h)$ mittels Taylor approximiert

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h \cdot f'(x_0) + \frac{1}{2} h^2 \cdot f''(x_0) + O(h^3).$$

Dies wird nun in $a(h)$ eingesetzt

$$\begin{aligned} a(h) =& \frac{f(x_0) + h \cdot f'(x_0) + \frac{1}{2} h^2 \cdot f''(x_0) + O(h^3) - f(x_0)}{h} \\ =& f'(x_0) + \frac{1}{2} h \cdot f''(x_0) + O(h^2). \end{aligned}$$

1.4 Idee:
Nun ist das Problem, dass $a(h)$ nicht an der Stelle $h = 0$ ausgewertet werden kann. Somit muss $a(h = 0)$ approximiert werden. Dafür wird durch die betrachteten Stützstellen h_i und deren Argumente $a(h_i)$ ein Polynom p gelegt, siehe Abb. (2).

1.5 Beispiel:
p sei hier nun linear. Damit lässt es sich schreiben als

$$p(t) = \left(\frac{t - \frac{h}{2}}{h - \frac{h}{2}} \right) a(h) + \left(\frac{t - h}{\frac{h}{2} - h} \right) a(h/2).$$

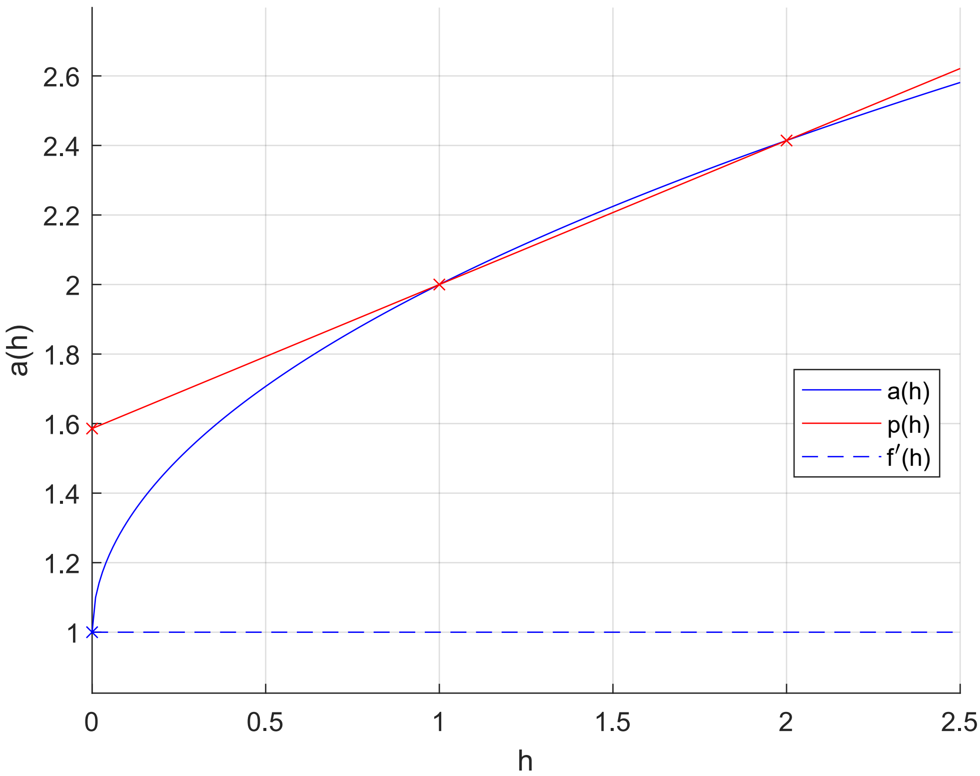

Abbildung 2: Extrapolationsfunktionen $a(h)$, $p(f)$

Dies kann nun an der Stelle 0, also im Grenzwert, wenn die Schrittweite 0 ist, ausgewertet werden:

$$\begin{aligned} p(0) &= \left(\frac{-\frac{h}{2}}{h-\frac{h}{2}}\right) a(h) + \left(\frac{-h}{\frac{h}{2}-h}\right) a(\frac{h}{2}) \\ &= -a(h) + 2a(\frac{h}{2}) \\ &= -f'(x_0) - \frac{h}{2} f''(x_0) - O(h^2) + 2f(x_0) + \frac{h}{2} f''(x_0) + O(h^2) \\ &= f'(x_0) + O(h^2). \end{aligned}$$

Damit ist nachgewiesen, dass die Ableitung mit einem Fehler zweiter Ordnung an der Stelle x_0 approximiert werden kann.

1.6 Beispiel:
Das bedeutet in der Praxis, dass zuerst der Differenzenquotient mit der Schrittweite h und $\frac{h}{2}$ ausgerechnet wird und dann durch ein Polynom zur Stelle 0 interpoliert wird:

1. $a(h) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ und $a(\frac{h}{2}) = \frac{f(x_0+\frac{h}{2})-f(x_0)}{\frac{h}{2}}$

2. $a(0) \approx p(0) = 2a(\frac{h}{2}) - a(h)$

Die Untersuchung wurde hier am Beispiel des rechtsseitigen Differenzenquotienten durchgeführt. Jedoch lässt dies sich verallgemeinern:

1.7 Satz (Einfache Extrapolation):
Sei $a : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ $(n-1)$-mal stetig differenzierbar und

$$a(h) = a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j h^j + a_{n+1}(h) h^{n+1},$$

wobei $a_j \in \mathbb{R}$, $a_{n+1}(h) = a_{n+1} + O(1)$.
Sei $(h_k)_{k\in\mathbb{N}}$, $h_k \in \mathbb{R}_+$ eine monoton fallende Folge mit $0 < \frac{n_{k+1}}{m_k} \leq \rho < 1$.
Sei $p_n^{(k)} \in \mathbb{P}_n$ das Interpolationpolynom zu

$$(h_k, a(h_k)), \dots, (h_{k+n}, a(h_{k+n})).$$

Dann gilt

$$a(0) - p_n^{(k)}(0) = O(h_k^{n+1}), (k \to \infty)$$

Beweis. Es gilt also zu zeigen, dass das Polynom n-ten Grades einen Fehler der Ordnung $O(h_k^{n+1})$ erzeugt.
Dafür wird das Interpolationspolynom in der Lagrange-Darstellung aufgeschrieben:

$$p_n^{(k)}(t) = \sum_{i=1}^{n} a(h_{k+i}) \cdot L_{k+i}^{(n)}(t), L_{k+i}^{(n)}(t) = \prod_{l=0,l\neq i}^{n} \frac{t - h_{k+l}}{h_{k+i} - h_{k+l}}$$

Setze nun $a(h)$ in $p_n^{(k)}(t=0)$ ein:

$$\begin{aligned} p_n^{(k)}(t=0) &= \sum_{i=0}^{n} \left(a_0 + \sum_{j=1} a_j h_{k+i}^j + a_{n+1}(h_{k+i}) h_{k+i}^{n+1} \right) L_{k+i}^{(n)}(0) \\ &= \sum_{i=0}^{n} \left(a_0 + \sum_{j=1} a_j h_{k+i}^j + (a_{n+1} + O(1))\, h_{k+i}^{n+1} \right) L_{k+i}^{(n)}(0) \end{aligned}$$

Nach [RRan, S. 129] gilt

$$\sum_{i=1}^{n} h_{k+i}^{r} L_{k+i}^{(n)}(0) = \begin{cases} 1 & , r = 0 \\ 0 & , r = 1, \dots, n \\ (-1)^n \prod_{i=0}^{n} h_{k+i} & , r = n+1 \end{cases} .$$

Dies eingesetzt in $p_n^{(k)}(t=0)$ ergibt

$$p_n^{(k)}(t=0) = a_0 + a_{n+1}(-1)^n \prod_{i=0}^{n} h_{i+k} + \sum_{i=0}^{n} O(1) \cdot h_{k+i}^{n+1} L_{k+i}^{(n)}(0)$$

Nun wird noch der Lagrange Term abgeschätzt und beschränkt:

$$|L_{k+i}^{(n)}(0)| = \prod_{l=0, l\neq i}^{n} |\frac{1}{\frac{h_{k+i}}{h_{k+l}} - 1}| < \prod_{l=0, l\neq i}^{n} |\frac{1}{\rho^{i-l} - 1}| = c(\rho, n).$$

Wenn dies nun in die vorherige Gleichung eingefügt wird, folgt

$$\begin{aligned} p_n^{(k)}(t=0) <& a_0 + a_{n+1}(-1)^n h_k^{n+1} + \sum_{i=1}^{n} O(1) h_{k+i}^{n+1} c(\rho, n) \\ \leq& a_0 + O(h_k^{n+1}). \end{aligned}$$

Damit ist der Satz gezeigt. □

1.8 BEISPIEL:
Eine bessere Approximation der Ableitung ist der mittlere Differenzeinquotient. Nutze für die Berechnung die Taylorapproximation:

$$\begin{aligned} a(h) =& \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} \\ =& \frac{1}{2h} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} h^k - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (-h)^k \right) \\ =& \frac{1}{2h} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} h^k - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(2k)}(x_0)}{(2k)!} h^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(2k+1)}(x_0)}{(2k+1)!} h^{2k+1} \right) \\ =& \frac{1}{2h} \left(2 \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(2k+1)}(x_0)}{(2k+1)!} h^{2k+1} \right) \\ =& \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(2k+1)}(x_0)}{(2k+1)!} h^{2k} \end{aligned}$$

Hierbei fällt auf, das nur noch gerade Polynome in Abhängigkeit von h auftreten, wodurch $a(h)$ eine gerade Funktion ist. Dies motiviert, dass als Approximation von $a(h)$ durch $p(h)$ auch nur gerade Polynome genutzt werden, wodurch sich direkt die Ordnung der Approximation verdoppelt:

$$p(h) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k h^{2k}$$

Auch dies lässt sich verallgemeinernd in einem Satz zusammenfassen:

1.9 SATZ (RICHARDSON-EXTRAPOLATION):
Sei $a(h) : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ für ein $q > 0$ eine $q(n+1)$-mal stetige differenzierbare Funktion mit

$$a(h) = a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j h^{qj} + a_{n+1}(h) h^{q(n+1)}$$

mit $a_j \in \mathbb{R}$, $a_{n+1}(h) = a_{n+1} + O(1)$.
Weiter sei $(h_k)_{k\in\mathbb{N}}$ eine monoton fallende Folge $h_k > 0$ mit $0 < \frac{h_{k+1}}{h_k} \leq \rho < 1$.
Es sei $p_n^{(k)} \in \mathbb{P}_n$ das Interpolationspolynom zu

$$(h_k^q, a(h_k^q)), \dots, (h_{n+k}^q, a(h_{n+k}^q)).$$

Dann gilt

$$a(0) - p_n^{(k)}(0) = O(h_k^{q(n+1)}), (k \to \infty)$$

2 Extrapolation bei gewöhnlichen Differentialgleichungen

Betrachte nun folgendes Anfangswertproblem:

$$\begin{cases} u'(t) = f(t, u(t)) & , t \in I = [t_0, t_0 + T] \\ u(t_0) = u_0 \end{cases}$$

Um nun die allgemeine Extrapolation auf gewöhnliche Differentialgleichungen anzuwenden, ist zuerst eine Aussage über die Fehler bei der Approximation zu treffen, sodass danach eine Aussage über die Ordnung möglich ist.

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

$$y_n = u(t_n) + h^m e_m(t_n) + \dots + h^N e_N(t_n) + h^{N+1} E_{N+1}(t_n; h).$$

Dabei ist $e_i(t)$ von h unabhängig, $E_{N+1}(t_n; h)$ ist beschränkt.

Beweis. Dieser Beweis ist in [RRan, S. 132] nachzulesen. □

Da mit diesem Satz gesichert ist, dass ein Fehler sich mit einer bestimmten Ordnung in Polynomen approximieren lässt, ist eine Extrapolation für Einschrittverfahren möglich. Da die Schrittweite als äquidistant angenommen wird, ist nur eine lokale Extrapolation möglich. Wenn die Schrittweite nicht äquidistant ist, wäre eine sinnvolle Fortsetzung in der Umgebung des Punktes möglich. Das Verfahren, welches nun approximiert wird, sollte folgende Eigenschaften aufweisen:

1. Es sollte ein möglichst einfaches Verfahren sein, da pro Zeitschritt eine Funktionsauswertung durchgeführt wird.
2. Es werden nicht steife Anfangswertprobleme betrachtet, somit sollte die Funktion explizit sein.
3. Aus Effizienzgründen sollte sich der Fehler auf h^2-Potenzen beschränken.

Damit ist praktisch nur die Mittelpunktregel von Relevanz:

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

2.2 Satz (Satz von Gragg):
Sei $f(t,x)$ nun $(2m+2)$-mal stetige differenzierbare Funktion auf $I \times \mathbb{R}^d$ und sei y_n die durch die Mittelpunktregel mit expliziter Euler-Formel als Startprozedur gelieferter Näherungslösung. Dann besteht die asymptotische Entwicklung

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

Dabei sind $a_k(t)$ und $b_k(t)$ unabhängig von h, $E_{2m+2}(t; h)$ ist beschränkt.

Somit liefert dieser Satz eine Formel, die den Fehler in geraden Potenzen in h approximiert. Jedoch ist der Term $a_k(t_n)+(-1)^n b_k(t_n)$ noch direkt von n abhängig. Diese Abhängigkeit, welche sich im flackernden Vorzeichen von $b_k(t_n)$ ausdrückt, ist nicht gewünscht. Diese Abhängigkeit kann gelöst werden, indem

$$\tilde{y}_n = \frac{1}{4} y_{n-1} + \frac{1}{2} y_n + \frac{1}{4} y_{y+1}$$

definiert wird. Somit folgt nach längerer Rechnung, dass

$$\tilde{y}_n = u(t_n) + h^2 \left(a_1(t_n) + \frac{1}{2} u^{(2)}(t_n) \right) + \sum_{k=2}^{m} h^{2k} \left(\tilde{a}_k(t_n) + (-1)^n \tilde{b}_k(t_n) \right) + O(h^{2m+2}).$$

Bei dieser Methode ist darauf zu achten, dass die Schrittreihenfolge $h_i = \frac{H}{n_i}$, $1 \leq n_0 < n_1 < \ldots$ dürfen nur gerade oder ungerade n_i's genutzt werden. Wenn auch jeweils andere genutzt werden, dann tritt das sich ändernde Vorzeichen wieder auf, was unerwünscht ist.
Mit all diesen Wissen kann nun die Anleitung zum Extrapolationverfahren nach Gragg-Stoer-Bulirsch erfolgen:

1. Wähle eine Grundschrittweite H zur Berechnung von $y_n = u(t_n)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$
2. Wähle nun $n_0 < n_1 < \cdots < n_m$ und berechne

$$\begin{aligned} \eta(t_n + h_i, h_i) &= y_n + h_i f(t_n, y_n), \text{ Anfangsschritt mit Euler,} \\ \eta(t_n + (\nu+1)h_i, h_i) &= \eta(t_n + (\nu-1)h_i, h_i) + 2h_i f(t_n + \nu h_i, \eta(t_n + \nu h_i, h_i)), \text{ Mittelpunktregel.} \end{aligned}$$

   Setze

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

3. Berechne die Diagonalwerte des Neville-Schemas. Setze

$$y_{n+1} := T_{mm},$$

   beginne bei 2.

2.3 Beispiel:
Betrachte das folgende Anfangswertproblem:

$$\begin{cases} u'(t) = -200tu(t)^2 \\ u(-3) = \frac{1}{901} \end{cases} \quad t \leq -3.$$

Die Lösung zu diesem Anfangswertproblem lautet $u(t) = (1 + 100t^2)^{-1}$, approximiere $u(0) = 1$.

1. Setze $H = 0.1$, nutze die Bulirsch-Folge $\left\{H, \frac{H}{2}, \frac{H}{4}, \frac{H}{6}, \frac{H}{8}\right\}$.
2. Berechne

$$\begin{aligned} \eta(t_n + h_i, h_i), \\ \eta(t_n + (\nu+1)h_i, h_i), \\ a(h_i). \end{aligned}$$

3. Berechne nun

$$\begin{aligned} T_{i,0} &:= a(h_i), \\ T_{i,k} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{\left(\frac{h_i}{h_{i+k}}\right)^2 - 1}, & i = 0, \ldots, m+1, k = 1, \ldots, m, \\ y_{n+1} &= T_{mm}, \\ U_{mm} &= 2T_{m+1,m} - T_{mm}. \end{aligned}$$

Wiederhole die Schritte (2) und (3) so lange, bis

$$H^{-1} |T_{mm} - U_{mm}| \leq \varepsilon |y_n|.$$

3 Literaturverzeichnis

- Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen, Rolf Rannacher, 2017, Heidelberg University Publishing
- Einführung in die numerische Mathematik, Thomas Richter, Thomas Wick, 2017, Springer Spektrum