Integration mit Extrapolationsverfahren (speziell mit dem Romberg-Verfahren)

Ziel ist die numerische Berechnung des Integrals

$$\int_a^b f(x)dx, \quad a, b \in \mathbb{R}$$

für eine gegebene Funktion f. Dazu seien äquidistante Stützstellen $x_i = a + h \cdot i$ mit $h = \frac{b-a}{n}$, $i = 0, \ldots, n$ vorausgesetzt. Dann gilt mit der *Trapezregel* für das Intervall $[x_i, x_{i+1}]$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \cong \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right).$$

Wenden wir die Trapezregel auf alle Intervalle $[x_i, x_{i+1}]$ an, so folgt die *zusammengesetzte Trapezregel*

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) =: T(h). \tag{1}$$

Bemerkung 1 *Die zusammengesetzte Trapezregel erfüllt die Fehlerungleichung*

$$\left| T(h) - \int_a^b f(x)dx \right| \leq \frac{b-a}{12} h^2 \max_{x \in [a,b]} |f''(x)| = \mathcal{O}(h^2)$$

und ist damit von zweiter Ordnung.

Man kann zeigen (siehe z.B. Stoer, Kapitel 3.2), dass $T(h)$ in geraden Potenzen von h entwickelt werden kann. D.h. es gibt eine Darstellung

$$T(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \tau_2 h^4 + \cdots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h) h^{2m+2} \tag{2}$$

mit dem unbekannten Koeffizienten

$$\tau_0 = \int_a^b f(x)dx = \lim_{h \to 0} T(h)$$

und anderen Koeffizienten τ_i, $i = 1, \ldots, m$, die ebenfalls von h unabhängig sind und uns hier nicht weiter interessieren. Mit Hilfe des Extrapolations-Verfahrens wollen wir τ_0 bestimmen.

Idee der Extrapolation

Wir betrachten eine Folge $(h_i)_{i\in\mathbb{N}}$ von $m+1$ Schrittweiten, sei

$$h_0 = b-a,\ h_1 = \frac{h_0}{n_1}, \dots, h_m = \frac{h_0}{n_m}, \quad n_i < n_{i+1},\, n_i \in \mathbb{N},\, i = 1, \dots, m.$$

Beispiel 1 *Eine mögliche Folge für die Schrittweiten bildet die Schrittweitenhalbierung. Diese Folge heißt Romberg-Folge:*

$$h_0 = b-a,\ h_i = \frac{h_0}{2^i}, \quad i = 0, 1, \dots,$$

also

$$h_0 = b-a,\ h_1 = \frac{h_0}{2},\ h_2 = \frac{h_1}{2},\ h_3 = \frac{h_2}{2}, \dots.$$

Mit Hilfe der Formel (1) bestimmen wir die Trapezsummen $T_{i,0} = T(h_i),\ i = 0, \dots, m$ für alle Schrittweiten h_i. Wichtig ist hier, dass z.B. die Auswertungen $f(a),\ f(b)$ in jeder Trapezsumme, also in der Trapezsumme für jedes h_i, vorkommen. Wünschenswert ist es, dass diese nicht jedes mal neu ausgerechnet werden, sondern der Wert von $T_{i-1,0}$ zur Berechnung von $T_{i,0}$ genutzt wird, um doppelte Auswertungen der Funktion f zu vermeiden. Nun kann das Polynom

$$\tilde{T}_{mm}(h) = a_0 + a_1 h^2 + \cdots + a_m h^{2m} \tag{3}$$

mit Hilfe einer Polynominterpolation bestimmt werden, wobei als Stützwerte die berechenbaren Trapezsummen dienen: $\tilde{T}_{mm}(h_i) = T(h_i)$, $i = 0 \dots, m$. Dann gilt

$$\tilde{T}_{mm}(0) = a_0 \cong \tau_0 \tag{4}$$

Beispiel 2 *Sei $m = 1$, d.h. es seien die Schrittweiten $h_0 = b-a$ und $h_1 = \frac{b-a}{2}$ gegeben. Dann folgt mit (1)*

$$\begin{aligned}
T(h_0) &= \sum_{i=0}^{0} \frac{h_0}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) = \frac{h_0}{2}\left(f(a) + f(b)\right) \\
T(h_1) &= \sum_{i=0}^{1} \frac{h_1}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right) = h_1 \left(\frac{f(a)}{2} + f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{f(b)}{2}\right).
\end{aligned}$$

Es soll $\tilde{T}_{mm}(h_i) = T(h_i)$, $i = 0 \dots, m$ gelten. Mit der Interpolationsformel

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i L_i(x_i) = \sum_{i=0}^{n} f_i \prod_{k=0, k\neq i}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}$$

für die Stützwerte $p(x_i) = f_i$ folgt (mit $x_i = h_i^2$, da nur gerade Exponenten von h in der Entwicklung (2) vorkommen) für das Polynom $\tilde{T}_{mm}(h)$ in $h = 0$:

$$\tilde{T}_{mm}(0) = \sum_{i=0}^{n} T(h_i) \prod_{k=0,k\neq i}^{n} \frac{-h_k^2}{h_i^2 - h_k^2}.$$

Also gilt insgesamt

$$\begin{aligned}\tilde{T}_{mm}(0) &= T(h_0)\frac{-h_1^2}{h_0^2 - h_1^2} + T(h_1)\frac{-h_0^2}{h_1^2 - h_0^2} \\ &= \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right).\end{aligned}$$

Algorithmus

Soll das ganze nun programmiert werden, geht man etwas anders vor als in dem Beispiel. Man geht in einem Programm zur Romberg-Integration nach folgenden Punkten vor.

- Berechne die $T_{i,0}$ mit Hilfe der Formeln (1). Es ist wichtig darauf zu achten, dass die Funktionsauswertungen f nicht doppelt berechnet werden! Wie ist der genaue Zusammenhang zwischen $T(h_i)$ und $T(h_{i+1})$? Kann $T(h_{i+1})$ mit Hilfe von $T(h_i)$ zum Teil dargestellt werden? Welche Funktionsauswertungen müssen noch berechnet werden?

- Spaltenweise wird dann folgendes Tableau berechnet:

$$\begin{array}{c|cccc} h_0 & T_{00} & & & \\ h_1 & T_{10} & T_{11} & & \\ h_2 & T_{20} & T_{21} & T_{22} & \\ h_3 & T_{30} & T_{31} & T_{32} & T_{33} \\ \vdots & & & & \end{array}$$

  Dabei errechnen sich die $T_{i,k}$ für $k > 0$ durch die Rekursion (nach dem Algorithmus von Neville, siehe Numerik I, Polynominterpolation)

$$T_{i,k} = T_{i,k-1} + \frac{T_{i,k-1} - T_{i-1,k-1}}{\left(\frac{h_{i-k}}{h_i}\right)^2 - 1}, \quad 1 \leq k \leq i \leq m$$

- Um allgemeine Integranden f zuzulassen, müssen Zeiger genutzt werden. Ist eine Funktion f in einem m-File `f.m` gespeichert durch

```
function f = f(x)

f(x) = sin(x)
```

kann sie in einem Programm an eine andere Funktion (hier: `romberg.m`) durch die Syntax

```
zu_berechnender_Wert = romberg(@f,a,b,relerr)
```

übergeben werden, ohne dass f selbst in dem Programm definiert wird.