Vorlesung Höhere Mathematik 2

Kapitel 7: Numerische Integration

9. Februar 2023

Zürcher Hochschule
für Angewandte Wissenschaften

Gliederung des Kapitels

Einführung

- Aus der Analysis sind uns die Problemstellungen der Differential- bzw. Integralrechnungen bereits bekannt.
- In diesem Kapitel werden wir nun auf einige Verfahren eingehen, mit denen einige Problemstellungen der numerischen Integration nicht analytisch, sondern numerisch angegangen werden können.

Lernziele

Lernziele:

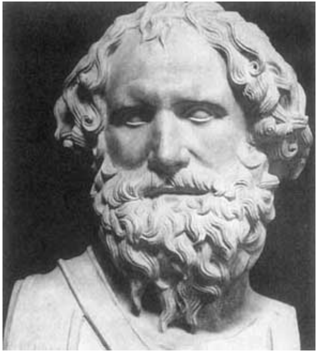
- Sie kennen die wichtigsten Verfahren der numerischen Integration und können damit bestimmte Integrale berechnen. Sie können die dabei auftretenden Fehler bestimmen.
- Sie können die Romberg-Extrapolation anwenden.
- Sie können die hier vorgestellten Verfahren in Python implentieren.

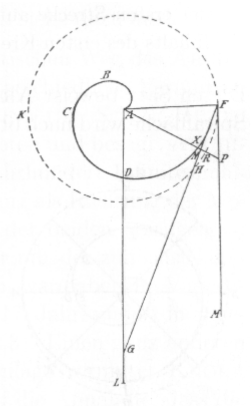
Zur historischen Entwicklung

Zur historischen Entwicklung

- Die Problemstellungen, Flächen zu berechnen oder Tangenten an geometrische Kurven zu legen, wurden bereits in der Antike untersucht.
- Archimedes ($287 - 212$ v.Chr.), einer der bedeutendsten Mathematiker der Antike, berechnete unendliche Reihen und ihm gelang die exakte Bestimmung des Flächeninhalts einer von einem Parabelbogen und einer Sekante begrenzten Fläche sowie die Konstruktion von Tangenten an die nach ihm benannte Archimedische Spirale.

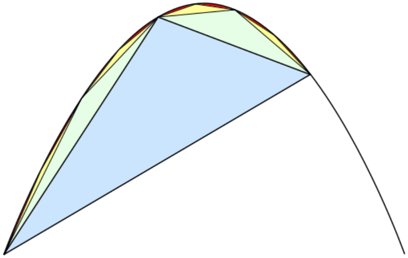
Zur historischen Entwicklung





- Archimedes und seine Tangentenkonstruktion.

Zur historischen Entwicklung



- Archimedes Berechung des Flächeninhalts A zwischen einer Sekanten und einer Parabel durch Aufsplitten der Fläche in Dreiecke.
- Er findet die folgende geometrische Reihe und ihren Summenwert (T ist die Fläche des blauen Dreiecks)

$$A = \left(1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{16} + \frac{1}{64} + \dots\right) T = \frac{4}{3} T$$

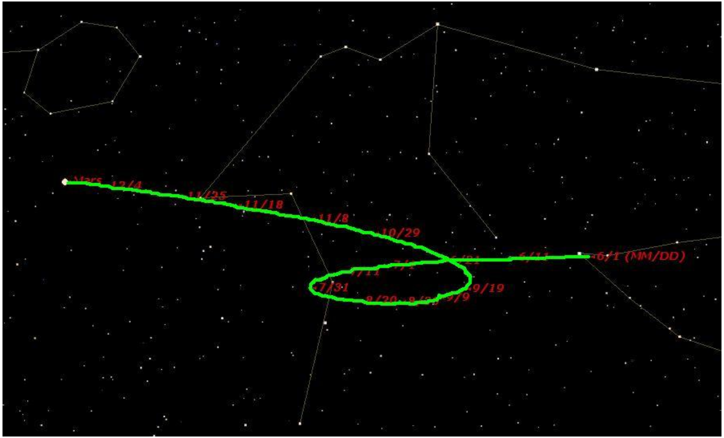
Zur historischen Entwicklung

- Das Konzept infinitesimal kleiner Grössen blieb aber über lange Zeit unvollständig und unverstanden.
- Bis ins 16. Jahrhundert gab es denn auf diesem Gebiet auch nur wenig Fortschritte.
- Der deutsche Astronom Johannes Keppler (1571 – 1630) benutzte in seinem Werk Astronomia Nova (1609) bei der Berechnung der Marsbahn Methoden, die heute als numerische Integration bezeichnet würden.
- Er versuchte ab 1612, den Rauminhalt von Weinfässern zu berechnen.

Zur historischen Entwicklung

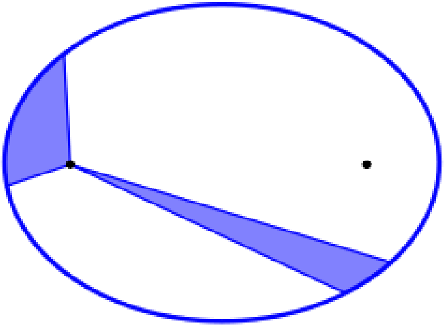
- Keppler, 1610

Zur historischen Entwicklung



- Marsbahn (Wikipedia Commons)

Zur historischen Entwicklung



- Zweites Keplersches Gesetz (Wikipedia Commons): Ein Planet auf der Umlaufbahn der Sonne überstreicht in gleichen Zeiträumen gleiche Flächen

Zur historischen Entwicklung

- Die eigentlichen Anfänge der Differentialrechnung gehen aber auf den französische Mathematiker Pierre de Fermat $(1601 - 1665)$ zurück.
- Er entwickelte 1628 die auch noch heute verwendete Methode, Extremstellen durch Nullsetzen der Tangentensteigung zu berechnen und konnte bereits Tangenten an Kegelschnitte und andere Kurven bestimmen.
- Sein Landsmann René Descartes $(1596 - 1650)$ entwickelte in La Géometrie 1637 eine Methode, Normalen zu berechnen.

Zur historischen Entwicklung

- Pierre de Format

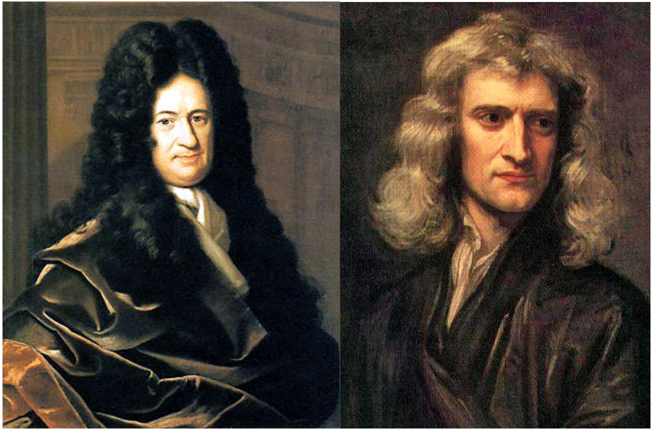
Zur historischen Entwicklung

- René Descartes, 1648

Zur historischen Entwicklung

- Ende des 17. Jahrhunderts, zur Zeit der Frühaufklärung, gelang es dann dem englischen Physiker Isaac Newton (1643 – 1727) und dem deutschen Mathematiker Gottfried Wilhelm Leibniz (1646 – 1716) unabhängig voneinander, widerspruchsfrei funktionierende Kalküle der Infinitesimalrechnung zu entwickeln.
- Ihre Arbeiten erlaubten das Abstrahieren von einer rein geometrischen Vorstellung.
- Leibniz entwickelte die heute gebräuchliche Notation mit dem Symbol $\int$ und dx.
- Newton benutzte sein Kalkül für bahnbrechende Berechnungen in der Mechanik. Im Jahr 1687 erschien sein Hauptwerk Philosophia Naturalis Principa Mathematica. Noch heute sprechen wir in der Physik in der klassischen Mechanik von den drei Newtonschen Gesetzen.

Zur historischen Entwicklung



- Gottfried Willhelm Leibniz (links) und Isaac Newton (rechts), um 1700

Zur historischen Entwicklung

- Nach Newton und Leibniz wurde die Infinitesimalrechnung durch die Schweizer Mathematiker und Brüder Jakob Bernoulli (1654 – 1705) und Johann Bernoulli (1667 – 1748) weiterentwickelt.
- Der Begriff des Integrals geht auf Johann Bernoulli zurück.
- Ebenfalls auf den Werken von Leibniz und Newton setzte der bedeutende Schweizer Mathematiker und Physiker Leonhard Euler (1707 in Basel geboren, 1783 in Petersburg gestorben) auf[1], der wegen seiner Beiträge in der Analysis und Zahlentheorie und weiteren Teilgebieten der Mathematik Berühmtheit erlangte.

[1] Von 1976-1995 auf der Schweizer 10 Franken Note abgebildet.

Zur historischen Entwicklung

- Jakob Bernoulli (links) und Johann Bernoulli (rechts)

Zur historischen Entwicklung

- Leonhard Euler, 1753

Zur historischen Entwicklung

- Im 19. Jahrhundert wurde die gesamte Analysis auf ein solideres Fundament gestellt.
- 1823 entwickelte der französische Mathematiker Augustin-Louis Cauchy (1789 – 1857) erstmals einen Integralbegriff, der den heutigen Ansprüchen an Stringenz genügt.

Zur historischen Entwicklung

- Augustin-Louis Cauchy

Numerische Integration

Numerische Integration

- Im Gegensatz zur Ableitung, die für alle differenzierbaren Funktionen analytisch berechnet werden kann, können Integrale für eine Vielzahl von Funktionen nicht analytisch gelöst werden.
- Verfahren zur numerischen Integration (man spricht auch von Quadratur) spielen daher eine wichtige Rolle, wie z.B. bei der numerischen Lösung von Differentialgleichungen in Kap. 8.

Problemstellung

- Für eine Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ soll das bestimmte Integral

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx$$

  auf einem Intervall $[a, b]$ numerisch berechnet werden.
- Die Funktion selbst kann als Funktionsgleichung $y = f(x)$ oder als Wertetabelle $(x_i, f(x_i))$ mit $i = 1, \ldots, m$ vorliegen.

Problemstellung

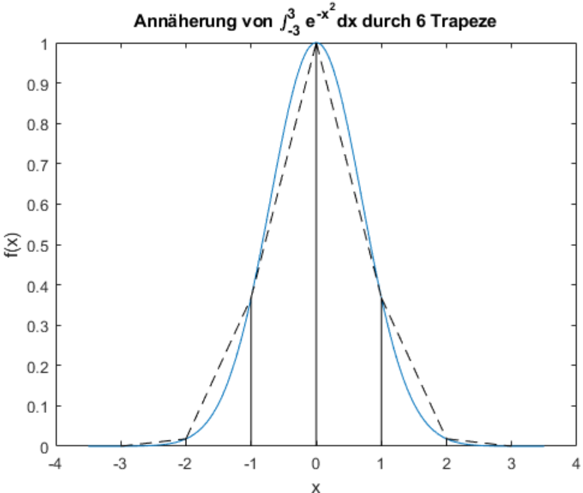
- Wir beschränken uns hier auf einige "Klassiker" unter den Quadratur- bzw. Integrationsverfahen, nämlich die **Newton-Cotes Formeln** im Rahmen der Rechtecks-, Trapez-, und Simpsonregel sowie die **Gauss-Formeln** und die **Romberg-Extrapolation**.
- Quadraturverfahren haben dabei im Allgemeinen die Form

$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i).$$

Dabei nennt man die x_i die *Stützstellen* oder *Knoten* der Quadraturformel und die a_i die *Gewichte*.

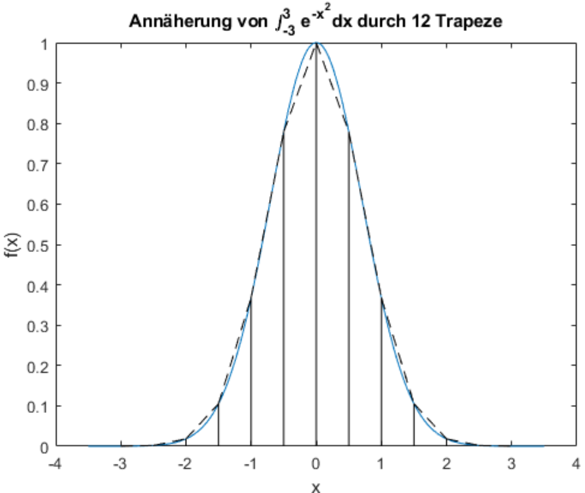
Problemstellung

- Ein Beispiel für $f(x) = e^{-x^2}$:



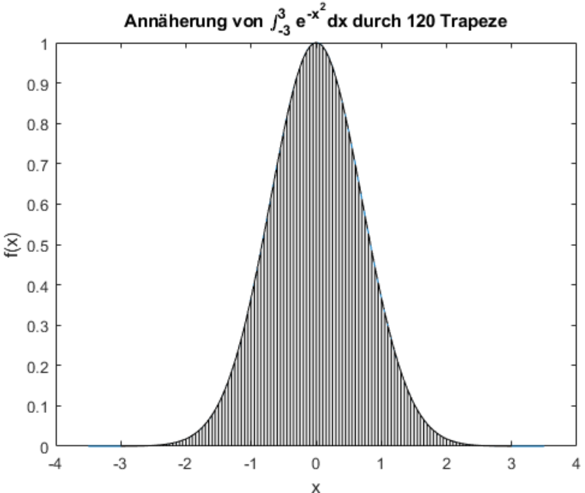
Problemstellung

- Ein Beispiel für $f(x) = e^{-x^2}$:



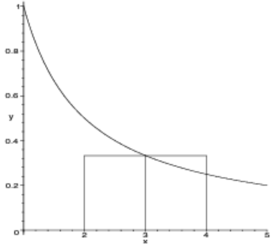
Problemstellung

- Ein Beispiel für $f(x) = e^{-x^2}$:



Beispiel 7.1

- Es soll $\int_2^4 \frac{1}{x} dx$ angenähert werden, indem $f(x) = \frac{1}{x}$ auf dem Intervall $[2, 4]$ durch eine Konstante angenähert wird.
- Lösung: Wir wählen den Funktionswert in der Mitte des Intervalls $[2, 4]$, also $f(3) = \frac{1}{3}$ und erhalten damit als Näherungswert $\int_2^4 \frac{1}{x} dx \approx (4-2) \cdot \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$ (vergleich Skizze unten).
  Zum Vergleich: der exakte Wert ist
  $\int_2^4 \frac{1}{x} dx = \ln(4) - \ln(2) = 0.6931\ldots$.



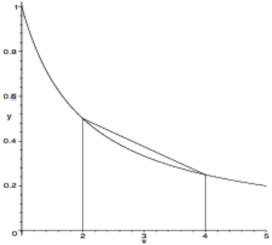
Beispiel 7.1 Fortsetzung

- Jetzt soll $\int_2^4 \frac{1}{x}dx$ durch ein Trapz angenähert werden. Zur Erinnerung: die Fläche eines Trapezes berechnet sich als

$$A = \frac{a+c}{2} \cdot h,$$

wobei a und c die parallelen Grundseiten des Trapezes sind und h seine Höhe.

- Lösung: $\int_2^4 \frac{1}{x}dx \approx \frac{f(2)+f(4)}{2}(4-2) = 0.75$



Rechteck- & Trapezregel

- Wir haben dabei die einfachste Form der Rechtecks- bzw. Trapezregel verwendet. Ihre Definition ist:

Definition 7.1 [1]: Rechteckregel / Trapezregel

- Die **Rechteckregel** (bzw. Mittelpunktsregel) Rf und die **Trapezregel** Tf zur Approximation von

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

sind definiert als

$$\begin{aligned} Rf &= f\left(\frac{a+b}{2}\right)\cdot(b-a) \\ Tf &= \frac{f(a)+f(b)}{2}\cdot(b-a) \end{aligned}$$

Rechteck- & Trapezregel

- Offensichtlich lohnt es sich, zur Steigerung der Genauigkeit das Intervall $[a, b]$ zu unterteilen in n Subintervalle der Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ und anschliessend aufzusummieren.
- Dann erhalten wir die summierte Rechtecks- bzw. Trapezregel:

Rechteck- & Trapezregel

Definition 7.2 [1]: summierte Rechteckregel / summierte Trapezregel

- Sei $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ stetig, $n \in \mathbb{N}$ die Anzahl Subintervalle $[x_i, x_{i+1}]$ auf $[a,b]$ mit der konstanten Breite $h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n}$ und $x_i = a + i \cdot h$ für $i = 0, ..., n-1$ und $x_n = b$.
  Die **summierte Rechteckregel** (bzw. summierte Mittelpunktsregel) $Rf(h)$ und die **summierte Trapezregel** $Tf(h)$ zur Approximation von $\int_a^b f(x)\,dx$ sind gegeben durch

$$
\begin{aligned}
Rf(h) &= h \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i + \frac{h}{2}) \\
Tf(h) &= h \cdot \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right)
\end{aligned}
$$

Aufgabe 7.1

- Berechnen Sie $\int_2^4 \frac{1}{x}dx$ näherungsweise mit der summierten Mittelpunkts- bzw. Trapezregel mit $n = 4$.

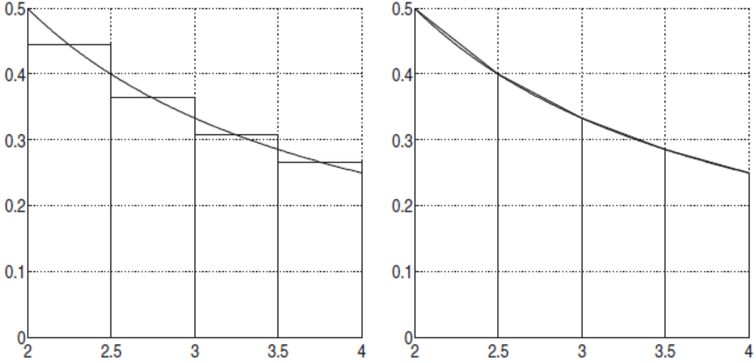


Abbildung: Summierte Rechteckregel (links) und summierte Trapezregel (rechts) für $n = 4$ zur Berechnung von $\int_2^4 \frac{1}{x}dx$.

Aufgabe 7.1: Lösung

Quiz

Beantworten Sie die folgende Frage:
Für stetige Funktionen $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ kann die Anzahl $n\in\mathbb{N}$ der Anzahl Subintervalle $[x_i,x_{i+1}]$ auf $[a,b]$ frei gewählt werden. Die Schrittweite ist dann konstant mit $h=x_{i+1}-x_i=\frac{b-a}{n}$ und $x_i=a+i\cdot h$ für $i=0,...,n-1$ und $x_n=b$ und es gilt:

$$Tf(h) \quad = \quad h\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\right)$$

Wie lautet die korrekte Formulierung für eine tabellierte Funktion, die nur durch die nicht äquidistanten Wertepaare $(x_i,y_i)_{0\le i\le n}$ und $h_i=x_{i+1}-x_i$? Eine korrekte Antwort:

A	B
$Tf(n)=h_i\cdot\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\right)$	$Tf(n)=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{y_i+y_{i+1}}{2}\cdot(x_{i+1}-x_i)$

C
$Tf(n)=h_i\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)\cdot h_i\right)$

Quiz: Lösung

Die Simpson-Regel

- Wir erhalten die Mittelpunkts- bzw. Rechtecksregel, wenn wir $f(x)$ in $\int_a^b f(x)dx$ durch eine Konstante (Polynom 0. Grades) ersetzen.
- Wenn wir $f(x)$ durch eine Gerade (Polynom 1. Grades) ersetzen, erhalten wir analog die Trapezregel.
- Nun können wir noch einen Schritt weitergehen und $f(x)$ durch ein Polynom $p(x)$ 2. Grades ersetzen.

Die Simpson-Regel

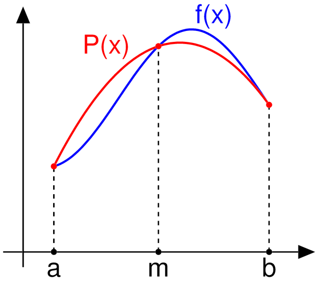


Abbildung: Die Funktion $f(x)$ wird auf dem Intervall $[a, b]$ durch ein Polynom $P(x)$ an den Stellen $x_1 = a$, $x_2 = m = \frac{b+a}{2}$ und $x_3 = b$ angenähert.

Die Simpson-Regel

- Wir machen für $p(x)$ und $x \in [a,b]$ den Ansatz

$$p(x) = \alpha + \beta(x-a) + \gamma(x-a)(x-b)$$

und fordern, dass $p(x)$ an den Stellen $x_1 = a$, $x_2 = \frac{b+a}{2}$ und $x_3 = b$ exakt mit $f(x)$ übereinstimmt, also:

$$\begin{aligned}
p(a) &= \alpha \stackrel{!}{=} f(a) \\
p(\frac{b+a}{2}) &= \alpha + \beta(\frac{b+a}{2} - a) + \gamma(\frac{b+a}{2} - a)(\frac{b+a}{2} - b) \\
&= \alpha + \beta(\frac{b-a}{2}) + \gamma(\frac{b-a}{2})(\frac{a-b}{2}) \stackrel{!}{=} f(\frac{b+a}{2}) \\
p(b) &= \alpha + \beta(b-a) \stackrel{!}{=} f(b)
\end{aligned}$$

Dies ist ein einfach lösbares lineares Gleichungssystem mit den unbekannten α, β, γ.

Die Simpson-Regel

- Die Lösung ist dann

$$
\begin{aligned}
\alpha &= f(a) \\
\beta &= \frac{f(b)-f(a)}{b-a} \\
\gamma &= \frac{f\left(\frac{b+a}{2}\right)-f(a)-\frac{f(b)-f(a)}{b-a}\cdot\left(\frac{b-a}{2}\right)}{-\left(\frac{b-a}{2}\right)^2} = \frac{f(a)-2f\left(\frac{b+a}{2}\right)+f(b)}{2\left(\frac{b-a}{2}\right)^2}.
\end{aligned}
$$

wobei wir $h=\frac{b-a}{2}$ gesetzt haben. Damit ist das Näherungspolynom $p(x)$ eindeutig bestimmt und wir können es mittels der Potenzregel einfach integrieren.

Die Simpson-Regel

- Wegen

$$f(x) \approx p(x)$$

gilt also

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

Dies ist die *Simpson-Regel*.

Die Simpson-Regel

- Nun können wir natürlich wie bei der Rechtecks- und Trapez-Regel die Genauigkeit erhöhen, indem wir das Intervall $[a, b]$ statt nur in eins in n Intervalle mit der Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ unterteilen und aufsummieren.
- Wir erhalten dann die *summierte Simpsonregel*

Die Simpson-Regel

Definition 7.3 [1]: summierte Simpsonregel

- Sei $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ stetig, $n \in \mathbb{N}$ die Anzahl Subintervalle $[x_i, x_{i+1}]$ auf $[a,b]$ mit der konstanten Breite $h = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n}$ und $x_i = a + i \cdot h$ für $i = 0, \ldots, n-1$ und $x_n = b$.
  Die **summierte Simpsonregel** $Sf(h)$ zur Approximation von

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

  ist gegeben durch

$$Sf(h) \equiv \frac{h}{3}\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

Aufgabe 7.2

- Zeigen Sie, dass die summierte Simpsonregel als gewichtetes Mittel der summierten Trapez- und Rechteckregel interpretiert werden kann:
$$Sf(h) = \frac{1}{3}(Tf(h) + 2Rf(h))$$
- Berechnen Sie $\int_2^4 \frac{1}{x} dx$ näherungsweise mit der summierten Simpsonregel mit $n = 4$.

Aufgabe 7.2 Lösung

Aufgabe 7.2: Lösung

Aufgabe 7.2: Lösung

Aufgabe 7.3

- Implementieren Sie die summierte Rechteck-, Trapez- und Simpsonregel in Python und überprüfen Sie Ihre manuellen Resultate aus Aufgaben 7.1 und 7.2.

Aufgabe 7.3: Lösung

Fehler der summierten Quadraturformeln

- Der Fehler einer Näherung ist wie immer definiert als der Betrag der Differenz zwischen dem exakten Wert und der Näherung.
- Für die summierte Rechtecksformel $Rf(h)$, die summierte Trapezformel $Tf(h)$ und die summierte Simpsonformel $Sf(h)$ gelten die folgenden Fehlerabschätzungen (ohne Beweis):

Fehler der summierten Quadraturformeln

Satz 7.1 [1]: Fehlerabschätzung für summierte Quadraturformeln

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - Rf(h)\right| \leq \frac{h^2}{24}(b-a)\cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - Tf(h)\right| \leq \frac{h^2}{12}(b-a)\cdot \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - Sf(h)\right| \leq \frac{h^4}{2880}(b-a)\cdot \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

Aufgabe 7.4

- Sie wollen

$$I = \int_0^{0.5} \mathrm{e}^{-x^2} \, dx$$

näherungsweise mit der summierten Trapezregel auf einen absoluten Fehler von maximal 10^{-5} genau berechnen.

- Bestimmen Sie eine geeignete Schrittweite h und berechnen Sie entsprechend den Wert der summierten Trapezregel.

Aufgabe 7.4: Lösung

Quiz

Beantworten Sie die folgende Frage:

Welche Aussagen bzgl. der Quadraturformeln stimmen? Mehrere richtige Antworten möglich:

- A. Die Rechtecksregel nähert die zu integrierende Funktion auf dem Integrationsintervall durch eine Konstante an, die Trapezregel durch eine Gerade, die Simpsonregel durch eine Parabel.
- B. Die summierte Trapezregel ist i.d.R. um einen Faktor 2 genauer als die summierte Rechtecksregel.
- C. Für die gleiche Genauigkeit benötigt die summierte Trapezregel i.d.R. eine kleinere Schrittweite h und damit mehr Schritte als die summierte Rechtecksregel.
- D. Die summierte Rechtecksregel ist i.d.R. genauer als die summierte Trapezregel, aber weniger genau als die summierte Simpsonregel.
- E. Die summierte Simpsonregel kann nicht aus der summierten Trapez- und Rechtecksregel hergeleitet werden.
- F. Ich kann keine der Fragen beantworten.

Quiz: Lösung

Gaussformeln

- Bisher haben wir die Stützstellen x_i äquidistant gewählt (d.h. die Schrittweite $h = \frac{b-a}{n}$ war konstant) und damit die Rechtecks-, die Trapez- und die Simpson-Formel hergeleitet.
- Diese drei Formeln werden auch als Newton-Cotes Formeln der Ordnung $N = 0$, 1 und 2 bezeichnet (entspricht dem Grad des verwendeten Polynoms).
- Die Stützstellen x_i müssen jedoch nicht zwingend äquidistant sein, sondern können so gewählt werden, dass sie das Integral $\int_a^b f(x)dx$ 'optimal' approximieren.

Gaussformeln

- Man erhält dann die sogenannten Gauss-Formeln. Dafür werden die Stützstellen x_i und die Gewichte a_i in der generellen Quadraturformel
$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$$
so gewählt, dass die 'Fehlerordnung' möglichst hoch wird bzw. der Fehler
$$\left| \int_a^b f(x)dx - I(f) \right|$$
möglichst klein.

Gaussformeln

- Wir wollen an dieser Stelle auf die genaue Herleitung verzichten und begnügen uns damit, die Gaussformeln für $n = 1$, 2 und 3 anzugeben (also für eine, zwei und drei Stützstellen).

Satz 7.2 [1]: Gauss Formeln für n =1, 2, 3:

- Die Gauss Formeln für $n = 1, 2, 3$ für $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$ lauten:
  - n = 1: $G_1 f = (b-a) \cdot f(\frac{b+a}{2})$
  - n = 2: $G_2 f = \frac{b-a}{2}\left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right)\right]$
  - n = 3: $G_3 f = \frac{b-a}{2}\left[\frac{5}{9} \cdot f\left(-\sqrt{0.6} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right) + \frac{8}{9} \cdot f\left(\frac{b+a}{2}\right)\right]$

$$+\frac{b-a}{2}\left[\frac{5}{9} \cdot f\left(\sqrt{0.6} \cdot \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right)\right]$$

Aufgabe 7.5

- Berechnen Sie das Integral

$$I = \int_0^{0.5} \mathrm{e}^{-x^2} \, dx$$

mit der summierten Rechtecks-, Trapez-, und Simpsonformel für $n = 3$ und vergleichen Sie den Wert mit der Gaussformel $G_3 f$.

Aufgabe 7.5: Lösung

Romberg Extrapolation

- Wir können für die Integration ein Extrapolationsschema verwenden, welches erlaubt, aus einigen Anfangsnäherungen für ein bestimmtes Integral einen genaueren Wert zu extrapolieren.
- Es so möglich, die mit der summierten Trapezformel berechneten Werte auf einfache Weise zu verbessern:

Romberg Extrapolation

Satz 7.3 [1]: Romberg-Extrapolation

- Für die summierte Trapezregel $Tf(h)$ zur näherungsweisen Berechnung von $I(f) = \int_a^b f(x)\,dx$ gilt:
  Sei $T_{j0} = Tf\left(\frac{b-a}{2^j}\right)$ für $j = 0, 1, \ldots, m$. Dann sind durch die Rekursion

$$T_{jk} = \frac{4^k \cdot T_{j+1,k-1} - T_{j,k-1}}{4^k - 1}$$

  für $k = 1, 2, \ldots, m$ und $j = 0, 1, \ldots, m-k$ Näherungen der Fehlerordnung $2k+2$ gegeben. Diese Methode heisst **Romberg-Extrapolation**. Die verwendete Schrittweitenfolge $h_j = \frac{b-a}{2^j}$ heisst auch Romberg-Folge.

Romberg Extrapolation

- Wir müssen also zuerst für $k = 0$ die T_{j0} mit der summierten Trapezformel für die fortlaufend halbierten Schrittweiten $h_j = \frac{b-a}{2^j}$ $(j = 0, 1, 2, ...m)$ berechnen, z.B. h, $\frac{h}{2}$, $\frac{h}{4}$, $\frac{h}{8}$ für $m = 3$.
- Damit erhalten wir T_{00}, T_{10}, T_{20}, T_{30} in der ersten Spalte des Extrapolationsschemas (s.u.).
- Anschliessend können wir diese Werte extrapolieren und erhalten die T_{jk} (für $k = 1, 2, ...m$) ohne grossen Rechenaufwand, wie im Schema dargestellt.

Romberg Extrapolation

- Natürlich muss jeweils die Anzahl $n_j = 2^j$ der Intervalle für die Berechnung der ersten Spalte T_{j0} mit der summierten Trapezregel angepasst werden.
- Das heisst, für jede Erhöhung von j müssen mehr Funktionsauswertungen gemacht werden, denn es gilt

$$T_{j0} = Tf(h_j) = h_j \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n_j-1} f(x_i) \right) \text{ mit } h_j = \frac{b-a}{2^j} \text{ und } n_j = 2^j \text{ und } x_i = a + ih_j.$$

Romberg Extrapolation

- Man erhält für die Extrapolation folgendes Schema (für z.B. $m = 3$):

$$
\begin{array}{ccccccc}
\boldsymbol{T_{j0}} & & \boldsymbol{T_{j1}} & & \boldsymbol{T_{j2}} & & \boldsymbol{T_{j3}} \\
\hline
T_{00} & & & & & & \\
 & \searrow & & & & & \\
 & & T_{01} = \frac{4\,T_{10} - T_{00}}{3} & & & & \\
 & \nearrow & & \searrow & & & \\
T_{10} & & & & T_{02} = \frac{16\,T_{11} - T_{01}}{15} & & \\
 & \searrow & & \nearrow & & \searrow & \\
 & & T_{11} = \frac{4\,T_{20} - T_{10}}{3} & & & & T_{03} = \frac{64\,T_{12} - T_{02}}{63} \\
 & \nearrow & & \searrow & & \nearrow & \\
T_{20} & & & & T_{12} = \frac{16\,T_{21} - T_{11}}{15} & & \\
 & \searrow & & \nearrow & & & \\
 & & T_{21} = \frac{4\,T_{30} - T_{20}}{3} & & & & \\
 & \nearrow & & & & & \\
T_{30} & & & & & &
\end{array}
$$

Beispiel 7.2

- Berechnen Sie
$$I = \int_2^4 \frac{1}{x} dx$$
näherungsweise mit der summierten Trapezregel und anschliessender Extrapolation ausgehend von den Schrittweiten $h_j = \frac{b-a}{n_J} = \frac{4-2}{2^j}$ für $j = 0, 1, 2, 3$.
- Denken Sie daran, dass sich die jeweilige Anzahl $n_j = 2^j$ der Intervalle in $T_{j0} = Tf(h_j)$ jeweils verdoppelt, und damit auch die Funktionsauswertungen $f(x_i)$ für die $x_i = a + ih_j$ zunehmen.

Beispiel 7.2: Lösung

- Zuerst berechnen wir die erste Spalte des Schemas mittels der summierten Trapezformel:

$$
\begin{aligned}
j=0, h_0=\frac{4-2}{2^0}=2, n_0=2^0=1 \Rightarrow T_{00} &= h_0 \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{0} f(x_i) \right) \\
&= h_0 \cdot \frac{f(a)+f(b)}{2} \\
&= h_0 \cdot \frac{f(2)+f(4)}{2} \\
&= 2 \cdot \frac{\frac{1}{2}+\frac{1}{4}}{2} \\
&= 0.75
\end{aligned}
$$

Beispiel 7.2: Lösung

$$
\begin{aligned}
j=1, h_1=\frac{4-2}{2^1}=1, n_1=2^1=2 \Rightarrow T_{10} &= h_1 \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+\sum_{i=1}^{1} f(x_i)\right) \\
&= h_1 \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2}+f(x_1)\right) \\
&= h_1 \cdot \left(\frac{f(2)+f(4)}{2}+f(3)\right) \\
&= 1 \cdot \left(\frac{\frac{1}{2}+\frac{1}{4}}{2}+\frac{1}{3}\right) \\
&= 0.7083333...
\end{aligned}
$$

Beispiel 7.2: Lösung

$$
\begin{aligned}
j = 2, h_2 = \frac{4-2}{2^2} = \frac{1}{2}, n_2 = 2^2 = 4 \Rightarrow T_{20} &= h_2 \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{3} f(x_i) \right) = \\
&= h_2 \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + f(x_3) \right) \\
&= h_2 \cdot \left(\frac{f(2)+f(4)}{2} + f(2.5) + f(3) + f(3.5) \right) \\
&= \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\frac{1}{2}+\frac{1}{4}}{2} + \frac{1}{2.5} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3.5} \right) \\
&= 0.6970238...
\end{aligned}
$$

Beispiel 7.2: Lösung

$$j = 3, h_3 = \frac{4-2}{2^3} = \frac{1}{4}, n_3 = 2^3 = 8 \Rightarrow T_{30} \;=\; h_3 \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{7} f(x_i) \right) =$$

$$= h_3 \cdot \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_7) \right)$$

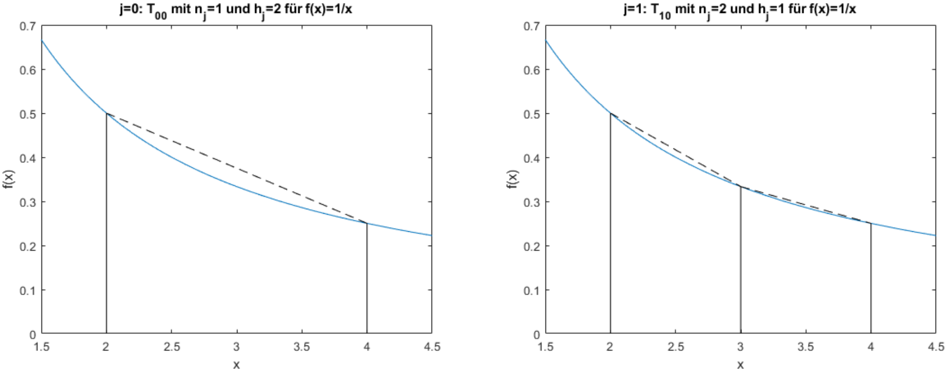
$$= h_3 \cdot \left(\frac{f(2)+f(4)}{2} + f(2.25) + f(2.5) + \ldots + f(3.75) \right)$$

$$= \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{\frac{1}{2}+\frac{1}{4}}{2} + \frac{1}{2.25} + \frac{1}{2.5} + \ldots + \frac{1}{3.75} \right)$$

$$= 0.6941218\ldots$$

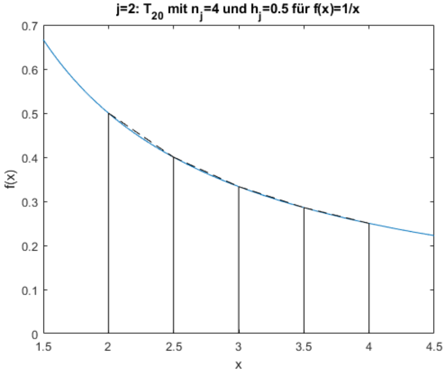
Beispiel 7.2: Lösung

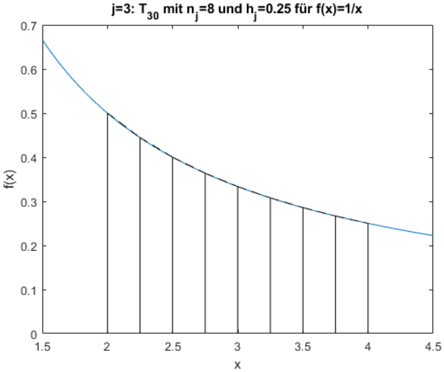
- Grafische Darstellung für T_{00} und T_{10}:



Beispiel 7.2: Lösung

- Grafische Darstellung für T_{20} und T_{30}:





Beispiel 7.2: Lösung

- Die weiteren Spalten erhalten wir mit der Romberg-Extrapolation (aus [1]):

Lösung: Wir gehen also aus von

$$T_{i0} := Tf\left(\frac{4-2}{2^i}\right) = Tf\left(\frac{1}{2^{i-1}}\right), \; h_i = \frac{1}{2^{i-1}} \text{ für } i = 0, 1, 2, 3 = n.$$

Mittels Romberg-Extrapolation erhalten wir das folgende Schema:

h	T_{i0}	T_{i1}	T_{i2}	T_{i3}
2	0.7500000000			
		0.6944444443		
1	0.7083333333		0.6931746033	
		0.6932539683		0.6931474775
0.5	0.6970238095		0.6931479013	
		0.6931545307		
0.25	0.6941218503			

Beispiel 7.2

Die zugehörigen Fehler $E_{ik} := |T_{ik} - I|$ sind:

h	E_{i0}	E_{i1}	E_{i2}	E_{i3}
2	0.0568528194			
		0.0012972637		
1	0.0151861527		0.0000274227	
		0.0001067877		0.0000002969
0.5	0.0038766289		0.0000007207	
		0.0000073501		
0.25	0.0009746697			

Die Fehler entwickeln sich im Dreiecksschema analog zur Extrapolation bei Differenzenformeln, vgl. Beispiel 7.6: abnehmender Fehler von oben nach unten und rechts nach links im Dreiecksschema. Auch hier sehen wir wieder, wie die Extrapolation mit geringem Aufwand einen großen Genauigkeitsgewinn bringt. Insbesondere sind, hat man erst die T_{i0} in der ersten Spalte berechnet, keine weiteren Auswertungen der zu integrierenden Funktion f nötig. ■

Quiz

Beantworten Sie die folgende Frage:

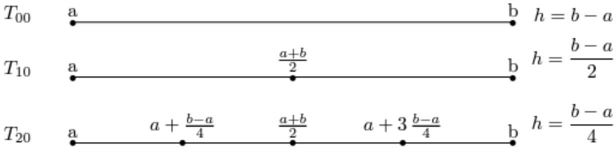
Welche Aussage bzgl. der Romberg-Extrapolation stimmt? Eine korrekt Antwort:

- A. Die Romberg-Extrapolation ist auf die Rechtecks- und Trapezregel anwendbar.
- B. Die Romberg-Extrapolation ist nur auf die Trapezregel anwendbar.
- C. Ich weiss nicht.

Quiz: Lösung

Romberg Extrapolation: Bemerkungen

1. Bei der Berechnung der T_{j0} in der ersten Spalte kann man Auswertungen der zu integrierenden Funktion einsparen, wie im Folgenden erläutert:
    1. für T_{00} werden nur die Funktionsauswertungen $f(a)$ und $f(b)$ benötigt
    2. für T_{10} wird zusätzlich zu $f(a)$ und $f(b)$ noch $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ benötigt
    3. für T_{20} kommen zusätzlich zu $f(a)$, $f(b)$, $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ noch $f\left(a+\frac{b-a}{4}\right)$ und $f\left(a+3\frac{b-a}{4}\right)$
    4. etc.



Romberg Extrapolation: Bemerkungen

- Darauf basierend lässt sich die summierte Trapezregel zu den halbierten Schrittweiten rekursiv formulieren, d.h. man berechnet die T_{j0} für $j \geq 1$ allein aus dem vorhergehenden Wert von $T_{j-1,0}$ und zwar über die folgende Rekursionsformel (ohne Beweis):

$$T_{j0} = \frac{1}{2} T_{j-1,0} + h_j \sum_{i=1}^{n_{j-1}} f(a + (2i-1)h_j)$$

wobei gilt $n_{j-1} = 2^{j-1}$ und $h_j = h_{j-1}/2$.

Romberg Extrapolation: Bemerkungen

- Betrachtet man den Extrapolationsschritt von T_{00}und T_{10} nach T_{01} nochmal genauer, so findet man:

$$\begin{aligned} T_{01} &= \frac{4T_{10} - T_{00}}{3} \\ &= \frac{1}{3}\left(4\left(\frac{b-a}{2}\cdot\frac{f(a)+f(b)}{2} + f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right) - \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))\right) \\ &= \frac{b-a}{6}(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)) = Sf. \end{aligned}$$

Das bedeutet, dass in der zweiten Spalte des Schemas nichts anderes steht als die Simpsonregel Sf steht (die analogen Resultate erhält man für T_{02}etc.).

Aufgabe 7.6

- Berechnen Sie das Integral

$$I = \int_0^{0.5} \mathrm{e}^{-x^2}\, dx$$

mit der summierten Trapezformel und Extrapolation für die Schrittweiten $h_j = \frac{b-a}{2^j}$ $(j = 0, 1, 2, 3)$.

Aufgabe 7.6: Lösung