

Numerische Integration

Zusammenfassung der Woche 14.7. - 18.7.

5.2 Monte-Carlo-Techniken

Wahrscheinlichkeitstheoretischer Ansatz:

- f : Zufallsvariable
- $\int_G f(x)dx$: erwarteter Wert
- $\mu(f) := \frac{1}{|G|} \int 1_G f(x)dx$: Mittelwert von f
- $\frac{1}{|G|} 1_G$: zugehörige Dichte
- $Q_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(y_i)$ Monte-Carlo-Schätzung für μ .

Die y_i sind als Stichproben (Abtastwerte) Realisierungen einer Folge $\{X_i\}_{i=1}^{\infty}$ von unabhängigen, gleichmäßig verteilten Zufallsvariablen mit gemeinsamer Dichte $\frac{1}{|G|} 1_G$. Daher ist die Kubatursumme $Q_N(f)$ die Realisierung der Zufallsvariablen

$$M_N(f) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i).$$

Nach dem starken Gesetz der großen Zahlen gilt mit Wahrscheinlichkeit 1

$$M_N(f) \rightarrow \mu(f), \quad N \rightarrow \infty.$$

Das bedeutet, dass im wesentlichen jede Folge von Realisierungen $\{Q_N(f)\}_{N=1}^{\infty}$ gegen $\mu(f)$ konvergiert.

Der Fehler $M_N(f) - \mu(f)$ kann mit wahrscheinlichkeitstheoretischen Mittel nur geschätzt werden. Die erwartete Standardabweichung für $M_N(f)$ ist

$$\sigma(M_N(f)) = \sqrt{\mu \left(M_N(f) - \mu(f) \right)^2}.$$

Andererseits ist aber $M_N(f)$ als Mittelwert der Zufallsvariablen f

$$\sigma(M_N(f)) = \frac{\sigma(f)}{\sqrt{N}}.$$

Für den erwarteten Fehler von $|Q_N(f) - \mu(f)|$ bedeutet dies ein $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N}})$ -Verhalten für $N \rightarrow \infty$.

Im Vergleich zu den iterierten Quadraturformeln mit deren $\mathcal{O}(\frac{1}{N^d})$ -Verhalten für $N \rightarrow \infty$ bei d -mal stetig differenzierbarem Integranden f (vgl. Satz 4 von Kapitel 3.2) ist hier die Konvergenz langsam. Allerdings wurden keine Voraussetzungen über die Glattheit von f gemacht.

Man kann durch sogenanntes *schichtweises Abtasten* (engl.: stratified sampling) die Konvergenzgeschwindigkeit verbessern, wenn der Integrand glatter ist. Auf Seymour Haber geht das folgende Verfahren zurück. Man teilt hierbei den Hyperwürfel $[0, 1]^n$ in $N := k^n$ Teilwürfel $C_{i_1, \dots, i_n} := [\frac{i_1-1}{k}, \frac{i_1}{k}] \times \dots \times [\frac{i_n-1}{k}, \frac{i_n}{k}]$. Wähle dann in jedem C_{i_1, \dots, i_n} einen Punkt y_{i_1, \dots, i_n} als Realisierung der Zufallsvariablen $X_{\mathbf{i}}$ mit $\mathbf{i} := (i_1, \dots, i_n)$. Dann ist

$$Q_N(f) := \frac{1}{k^n} \sum_{i_1=1}^k \cdots \sum_{i_n=1}^k f(y_{i_1, \dots, i_n}).$$

Von Haber wurde gezeigt, dass es für beliebige $f \in C^1([0, 1]^n)$ ein $c > 0$ gibt, das nur von $\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}$ abhängt, so dass gilt

$$|Q_N(f) - I(f)| \approx \frac{c}{N^{1/2+1/n}} \quad \text{für grosse } N.$$

Noch besseres Konvergenzverhalten erhält man, wenn man $f \in C^2([0, 1]^n)$ betrachtet und mit $y_{i_1, \dots, i_n} \in C_{i_1, \dots, i_n}$ auch noch den Punkt y_{i_1, \dots, i_n}^* nimmt, der in C_{i_1, \dots, i_n} so gewählt ist, dass der Mittelpunkt von C_{i_1, \dots, i_n} zugleich Mittelpunkt der Verbindungsstrecke von y_{i_1, \dots, i_n} zu y_{i_1, \dots, i_n}^* ist. Dann gilt nach Haber für

$$Q_N^*(f) := \frac{1}{2N} \sum_{i_1=1}^k \cdots \sum_{i_n=1}^k \left(f(y_{i_1, \dots, i_n}) + f(y_{i_1, \dots, i_n}^*) \right)$$

die asymptotische Aussage

$$|Q_N^*(f) - I(f)| \approx \frac{c^*}{N^{1/2+2/n}} \quad \text{für grosse } N,$$

wenn $f \in C^2([0, 1]^n)$. Dabei hängt $c^* > 0$ nur von den zweiten Ableitungen von f ab.

5.3 Gitterregeln (lattice rules)

Definition 6. $L \subset \mathbb{R}^n$ wird *Gitter* genannt, wenn

- 1) $x_1, x_2 \in L \Rightarrow x_1 + x_2 \in L, x_1 - x_2 \in L,$
- 2) L enthält n linear unabhängige Elemente,
- 3) $0 \in \mathbb{R}^n$ ist ein isolierter Punkt von L , d.h., es gibt eine Umgebung von L ,

die außer 0 keinen Punkt von L enthält.

Beispiel 1. Sei $n = 1$. Dann ist $L := \{\frac{i}{N} \mid i \in \mathbb{Z}\}$ ein Gitter.

Beispiel 2. Seien $p_1, \dots, p_n \in \mathbb{R}^n$ linear unabhängig und

$$L := \left\{ \sum_{\nu=1}^n i_\nu p_\nu \mid i_1, \dots, i_n \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Dann ist L ein Gitter. Ist e_ν der ν -te Einheitsvektor, dann bekommt man speziell für $p_\nu = \frac{1}{k}e_\nu$, $\nu = 1, \dots, n$,

$$L = \left\{ \left(\frac{i_1}{k}, \dots, \frac{i_n}{k} \right) \mid i_1, \dots, i_n \in \mathbb{Z} \right\}.$$

Definition 7. Ein *Integrationsgitter* L ist ein Gitter, das \mathbb{Z}^n enthält.

Definition 8. Eine *Gitterregel* zur numerischen Berechnung von Integralen $\int_{[0,1]^n} f(x)dx$ ist eine Kubaturformel, bei der die Knoten

$$y_k \in [0, 1)^n, \quad k = 1, \dots, N,$$

Punkte eines Integrationsgitters sind und alle Gewichte gleich $\frac{1}{N}$ sind.

Ist der Integrand f in Definition 8 eine 1-periodische Funktion, also

$$f(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n) = f(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i + 1, x_{i+1}, \dots, x_n)$$

für alle $i = 1, \dots, n$ und alle $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, dann lautet die Produkt-Trapezregel

$$Q_T^{(n)}(f) = \frac{1}{N} \sum_{i_1=0}^{k-1} \dots \sum_{i_n=0}^{k-1} f\left(\frac{i_1}{k}, \dots, \frac{i_n}{k}\right) \quad \text{mit } N = k^n$$

und ist eine Gitterregel zum Integrationsgitter $L = \{(\frac{i_1}{k}, \dots, \frac{i_n}{k}) \mid i_\nu \in \mathbb{Z}\}$.

Wenn man ein $N \in \mathbb{N}$ und einen Vektor $p^* := (p_1^*, \dots, p_n^*) \in \mathbb{N}^n$ fest vorgibt mit der Eigenschaft

$$g.g.T.(p_1^*, \dots, p_n^*, N) = 1,$$

dann bekommt man durch

$$A := \left\{ \left(\left\{ \frac{i}{N} p_1^* \right\}, \dots, \left\{ \frac{i}{N} p_n^* \right\} \right) \mid i \in \mathbb{Z} \right\}$$

eine Punktmenge in $[0, 1)^n$. Hierbei ist (wie in 5.1 nach Definition 1) $\{x\}$ der Nachkomma-Anteil der Zahl $x > 0$. Durch

$$L := \{u + z \mid u \in A, z \in \mathbb{Z}^n\}$$

bekommt man ein Integrationsgitter L , dessen Punkte in $[0, 1]^n$ gerade die Punkte aus $A = L \cap [0, 1]^n =: A(L)$ sind. Diese Konstruktionsmethode wird *Methode der guten Gitterpunkte* genannt. Die Bezeichnung *gut* rührt zum großen Teil auch daher, dass man die Punkte aus A sehr bequem berechnen kann. Man muss nur p^* speichern und kann dann die N Punkte aus A

$$y_i := \left(\left\{ \frac{i}{N} p_1^* \right\}, \dots, \left\{ \frac{i}{N} p_n^* \right\} \right), \quad i = 0, \dots, N - 1,$$

bequem der Reihe nach berechnen.

Statt sich nur einen Vektor p^* vorzugeben, kann man sich auch mehrere vorgeben. Dies führt auf die allgemeinste Form von Gitterregeln, wie das folgende Resultat von Sloan und Joe zeigt. (Hier wird vorausgesetzt, dass der Integrand f 1-periodisch ist, weil einige der Knoten nicht in $[0, 1]^n$ liegen)

Satz 4 (Sloan und Joe)

Die Kubatursumme jeder n -dimensionale Gitterregel Q_N kann geschrieben werden als

$$Q_N(f) = \frac{1}{n_1 \cdots n_m} \sum_{i_1=0}^{n_1-1} \cdots \sum_{i_m=0}^{n_m-1} f\left(\frac{i_1}{n_1} z_1 + \cdots + \frac{i_m}{n_m} z_m\right),$$

wobei $z_1, \dots, z_m \in \mathbb{Z}^n$ linear unabhängig sind und

$$n_{j+1} | n_j, \quad j = 1, \dots, m - 1, \quad n_m > 1.$$

Für 1-periodische Integranden f kann man in Abhängigkeit von der Differenzierbarkeitsordnung von f Fehlerabschätzungen des Typs

$$|I(f) - Q_N(f)| = \mathcal{O}(\rho_N^{-\alpha}), \quad N \rightarrow \infty,$$

herleiten, wo α von f und ρ_N von der gewählten Gitterregel (mit Kubatursumme Q_N) abhängt.