

Numerische Integration (Quadratur)

Problem: Berechnung des bestimmten Integrals

$$Y = \int_a^b y(x) dx$$

wenn die Stammfunktion nicht bekannt ist
oder sogar nur in Form einer empirischen
Tabelle vorliegt.

Formeln für Integration über ein Intervall:

1. Rechteck-Näherung:

$$Y = \int_a^b y(x) dx \approx (b - a)y(a)$$

2. Trapez-Regel (Approximation von $y(x)$ mit einer linearen Funktion):

$$y(x) \approx p_1(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{h}(x - x_0)$$

$$Y = \int_{x_0}^{x_0+h} y(x) dx \approx \frac{h}{2}(y_0 + y_1)$$

3. Simpson-Regel (Approximation von $y(x)$ mit einer quadratischen Funktion):

$$y(x) \approx p_2(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{h}(x - x_0) + \frac{(y_2 - 2y_1 - y_0)}{2h^2}(x - x_0)(x - x_1)$$

$$Y = \int_{x_0}^{x_0+2h} y(x) dx \approx \frac{2h}{6}(y_0 + 4y_1 + y_2)$$

4. Newton-Cotes-Formeln: Approximation von $y(x)$ durch ein Interpolationspolynom beliebiger Ordnung

Erhöhung der Genauigkeit durch Unterteilung in feinere Intervalle:

1. Trapez-Regel:

$$Y = \int_{x_1}^{x_N} y(x) dx \approx h \left(\frac{1}{2}y_1 + y_2 + y_3 + \dots + y_{N-1} + \frac{1}{2}y_N \right)$$

2. Simpson-Regel:

$$Y = \int_{x_1}^{x_N} y(x) dx \approx h \left(\frac{1}{3}y_1 + \frac{4}{3}y_2 + \frac{2}{3}y_3 + \dots + \frac{2}{3}y_{N-2} + \frac{4}{3}y_{N-1} + \frac{1}{3}y_N \right)$$

Achtung: Die Anzahl der Stützstellen muß ungradzahlig sein!

Herleitung durch Taylor-Entwicklung:
(Nullpunkt in die Intervallmitte gelegt)

$$\text{Trapez-Regel: } Y = \int_0^h y(x) dx = h(a_0 y_0 + a_1 y_1) + R$$

$$\text{Simpson-Regel: } Y = \int_{-h}^h y(x) dx = 2h(a_{-1} y_{-1} + a_0 y_0 + a_1 y_1) + R$$

Entwicklung von y_{-1} und y_1 um die Stelle $x = 0$:

$$y_{-1} = y_0 - y'_0 h + y''_0 \frac{h^2}{2!} - y'''_0 \frac{h^3}{3!} + y^{IV}_0 \frac{h^4}{4!} - + \dots$$

$$y_0 = y_0$$

$$y_1 = y_0 + y'_0 h + y''_0 \frac{h^2}{2!} + y'''_0 \frac{h^3}{3!} + y^{IV}_0 \frac{h^4}{4!} + + \dots$$

Andererseits:

$$y(x) = y_0 + y'_0 x + y''_0 \frac{x^2}{2!} + y'''_0 \frac{x^3}{3!} + y^{IV}_0 \frac{x^4}{4!} + + \dots$$

$$\begin{aligned} \int_0^h y(x) dx &= y_0 x + \frac{1}{2} y'_0 x^2 + \frac{1}{3} y''_0 \frac{x^3}{2!} + \frac{1}{4} y'''_0 \frac{x^4}{3!} + \frac{1}{5} y^{IV}_0 \frac{x^5}{4!} + + \dots \Big|_0^h \\ &= h \left(y_0 + \frac{1}{2} y'_0 h + \frac{1}{3} y''_0 \frac{h^2}{2!} + \frac{1}{4} y'''_0 \frac{h^3}{3!} + \frac{1}{5} y^{IV}_0 \frac{h^4}{4!} + + \dots \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{-h}^h y(x) dx &= y_0 x + \frac{1}{2} y'_0 x^2 + \frac{1}{3} y''_0 \frac{x^3}{2!} + \frac{1}{4} y'''_0 \frac{x^4}{3!} + \frac{1}{5} y^{IV}_0 \frac{x^5}{4!} + + \dots \Big|_{-h}^h \\ &= 2h \left(y_0 + \frac{1}{3} y''_0 \frac{h^2}{2!} + \frac{1}{5} y^{IV}_0 \frac{h^4}{4!} + + \dots \right) \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich Trapez-Regel:

$$\begin{array}{rcl} y_0 : & a_0 + a_1 & = 1 \\ y'_0 h : & & + a_1 = \frac{1}{2} \end{array}$$

$$\implies a_0 = a_1 = \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned} R &= Y - \frac{h}{2} (y_0 + y_1) \\ &= h y''_0 \frac{h^2}{2!} \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2} \right) + \dots \\ &= -\frac{h^3}{12} y''_0 + \dots = -\frac{h^3}{12} y''(\xi) \end{aligned}$$

$Y = \int_0^h y(x) dx = \frac{h}{2} (y_0 + y_1) - \frac{h^3}{12} y''(\xi)$
--

Man beachte: Bei Integration über das Intervall $[a, b]$ nimmt die Anzahl der Intervalle zu:

$$N = \frac{b - a}{h}$$

Deshalb nimmt die Genauigkeit des gesamten Integrals nur mit der Ordnung h^2 zu.

Koeffizientenvergleich Simpson-Regel:

$$\begin{aligned} y_0 : & \quad a_{-1} + a_0 + a_1 = 1 \\ y'_0 h : & \quad -a_{-1} + a_1 = 0 \\ y''_0 h^2 : & \quad a_{-1} + a_1 = \frac{1}{3} \end{aligned}$$

$$\implies a_{-1} = a_1 = \frac{1}{6}, \quad a_0 = \frac{4}{6}$$

$$\begin{aligned} R &= Y - \frac{h}{3} (y_{-1} + 4y_0 + y_1) \\ &= 2hy_0^{IV} \frac{h^4}{4!} \left(\frac{1}{5} - \frac{1}{6} - \frac{1}{6} \right) + \dots \\ &= -\frac{h^5}{90} y_0^{IV} + \dots = -\frac{h^5}{90} y^{IV}(\xi) \end{aligned}$$

$Y = \int_{-h}^h y(x) dx = \frac{h}{3} (y_{-1} + 4y_0 + y_1) - \frac{h^5}{90} y^{IV}(\xi)$
--

Analog zur Trapezregel nimmt die Genauigkeit des **gesamten Integrals** nur mit der Ordnung h^4 zu.

Monte-Carlo-Integration

Grundidee der Monte-Carlo-Verfahren:

- verwendet um Näherungslösungen für mathematische/physikalische Probleme zu erhalten
- theoretische Erwartungswerte werden durch Mittelwerte über Stichprobe genähert
- Stichproben werden mit Hilfe von Zufallszahlen generiert
- Fluktuationen der Mittelwerte führen zu statistischen Varianzen, die zu berücksichtigen sind

- Problemstellungen stochastischer – aber auch deterministischer – Natur
- Anwendungsgebiete
 - Stochastik
 - Optimierung
 - Hochdimensionale Integration (insbesondere, wenn über Gebiete mit komplexen Grenzen integriert werden soll)
 - Differentialgleichungen
 - physikalische Prozesse

Monte-Carlo-Integration

Vorteile:

- einfache Behandlung von Volumen mit komplexen Grenzen
- Flexibilität: Rechnung, bis die gewünschte Genauigkeit erreicht ist. (Vorabfestlegung eines Gitters nicht notwendig)

Nachteil: Abnahme des Fehlers nur mit $1/\sqrt{N}$

$$\int f dV \approx V \bar{f} \pm V \sqrt{\frac{\overline{f^2} - \bar{f}^2}{N}}$$

Zufallszahlen

- Zufallszahlengeneratoren liefern sogenannte Pseudo-Zufallszahlen
- mit Hilfe von **deterministischen Algorithmen** werden Folgen von “Zufallszahlen” erzeugt
- mit demselben Startwert wird dieselbe Folge von “Zufallszahlen” produziert
- Anforderungen an einen guten Zufallszahlengenerator:

gute Statistik (Tests)

lange Perioden (Korrelationen)

Reproduzierbarkeit

schnell

- Gängige Zufallszahlengeneratoren liefern Zahlen im Intervall $[0, 1)$
 - Im Mehrdimensionalen Fall erzeugt und benutzt man für jede Dimension jeweils eine Zufallszahl
 - Eindimensional: Transformation $[0, 1] \longrightarrow [a, b]$
-

Zufallszahlengenerator **RAN2**

Bedienung: `Zufallszahl = RAN2 (IDUM)`

IDUM Integer-Variable

- Initialisieren mit einer negativen ganzen Zahl
- geeignet sind z.B. Sekunden/Tausendstelsekunden der Uhrzeit (`DATE_AND_TIME`)
- danach sollte **IDUM** nicht mehr geändert werden!