Kapitel 6

Numerisches Differenzieren und Integrieren

6.1 Differenzieren

Ein Anwendungsbeispiel für numerische Differentiation ist die Bestimmung der Momentangeschwindigkeit $v = \dot{x}(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x(t+\Delta t)-x(t)}{\Delta t}$. Außer im Fall einer im gesamten Wertebereich bekannten Funktion $x(t)$, ist der Grenzfall $\lim_{\Delta t \to 0}$ allerdings nicht zu erreichen - man hat häufig nur diskrete Datenpunkte zur Verfügung.

6.1.1 Die erste Ableitung

Die diskrete, mittlere Geschwindigkeit kann man durch Messung des zurückgelegten Weges x_i zu bestimmten Zeitpunkten t_i bestimmen (wobei $i = 1, ..., N$). Man erhält eine Tabelle mit N Datenpunkten, aus denen die Steigung $\dot{x}(t)$ der Kurve $x(t)$ bestimmt werden kann. Mit $x_i = x(t_i)$ und $v_i = v(t_i)$ kann man die folgenden drei einfachsten Möglichkeiten definieren:

1. "vorwärts Ableiten":

$$v_i^v = \frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i} \tag{6.1}$$

(es wird der *"vorwärts"* nächstliegende Punkt $x(t_{i+1})$ zu Hilfe genommen)

2. "rückwärts Ableiten":

$$v_i^r = \frac{x_i - x_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \tag{6.2}$$

(es wird der *"rückwärts"* nächstliegende Punkt $x(t_{i-1})$ zu Hilfe genommen)

3. "zentrales Ableiten":

$$v_i^z = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{t_{i+1} - t_{i-1}} \tag{6.3}$$

(die beiden Punkte *vor und nach* $x(t_i)$ werden benutzt)

Frage:
Welche dieser drei Möglichkeiten gibt den besten bzw. genauesten Wert der Ableitung?

Mit $h := t_{i+1} - t_i \; \forall \, i$ ist die *Taylorentwicklung* für $x(t \pm h)$:

$$x(t \pm h) = \underbrace{x(t)}_{0.} \pm \underbrace{hv(t)}_{1.} + \underbrace{\frac{h^2}{2}\dot{v}(t)}_{2.} \pm \underbrace{\frac{h^3}{6}\ddot{v}(t)}_{3.\text{Ordnung}} + ... \tag{6.4}$$

Damit erhält man für die obigen Ableitungsformeln (6.1)-(6.3)

$$v^v(t) = \frac{x(t+h) - x(t)}{h} = v(t) + \frac{h}{2}\dot{v}(t) + ... = v(t) + O(h^1) \ , \tag{6.5}$$

$$v^r(t) = \frac{x(t) - x(t-h)}{h} = v(t) + \frac{h}{2}\dot{v}(t) + ... = v(t) + O(h^1) \tag{6.6}$$

und

$$v^z(t) = \frac{x(t+h) - x(t-h)}{2h} = v(t) + \frac{2h^2}{3}\ddot{v} + ... = v(t) + O(h^2) \tag{6.7}$$

Der Fehler von $v^v(t)$ und $v^r(t)$ ist also von 1. Ordnung, während der Fehler von $v^z(t)$ nur von 2. Ordnung in h ist, d.h. $v^z(t)$ stellt die "bessere" Ableitung dar.

Die numerische Ableitung kann systematisch weiter verbessert werden: Eine Formel mit Genauigkeit höherer Ordnung wäre z.B.:

$$v_i^{sz} = \frac{1}{12h}(-x_{i+2} + 8x_{i+1} - 8_{i-1} + x_{i-2}) \tag{6.8}$$

Aufgabe: Zeigen Sie durch Taylorentwicklung von $x(t \pm 2h)$ und $x(t \pm h)$, daß v_i^{sz} aus (6.8) die Ableitung bis auf Terme der Ordnung h^4 richtig wiedergibt!

6.1.2 Die zweite Ableitung

Für höhere Ableitungen gibt es ähnliche Entwicklungen wie oben gezeigt; diese sind manchmal zur Lösung von Differentialgleichungen nötig:

$$\begin{aligned} a(t) &= \dot{v}(t) = \ddot{x}(t) \\ a_i &= \frac{\frac{x_{i+1}-x_i}{h} - \frac{x_i - x_{i-1}}{h}}{h} = \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{h^2} \ . \end{aligned} \tag{6.9}$$

Der Quotient in Gleichung (6.9) kann durch eine Vorwärts- mit darauffolgender Rückwärts-Ableitung berechnet werden. Die auftretenden Restterme in Gleichung (6.9) sind von Ordnung h^2.

Eine Formel für die zweite Ableitung mit Fehler 4. Ordnung in h ist z.B.

$$a_i = \frac{1}{12h^2}(-x_{i+2} + 16x_{i+1} - 30x_i + 16x_{i-1} - x_{i-2}) \ . \tag{6.10}$$

6.1.3 Numerische Probleme

Neben der Tatsache, daß eine Berechnung mit höherer Genauigkeit auch mehr Aufwand (Funktionsberechnungen) erfordert, hat die numerische Berechnung von Ableitungen das prinzipielle Problem der sog. Stellenauslöschung: Bei endlicher Darstellungsgenauigkeit (`double`s haben etwa 16, `float`s nur 7 Stellen Genauigkeit) erhält man bei Differenzenbildung einen Verlust an Genauigkeit, wenn Zahlen in der gleichen Größenordnung voneinander subtrahiert werden. Zum Beispiel verliert man in der folgenden Rechnung

$$\frac{0.264345 - 0.259123}{0.129001 - 0.121112} \approx 0.66193 \tag{6.11}$$

2 Stellen Genauigkeit, wenn man nur mit 3 Stellen in der Mantisse arbeitet:

$$\frac{0.264 - 0.259}{0.129 - 0.121} = \frac{0.005}{0.008} = 0.625. \tag{6.12}$$

6.2 Quadraturen

Problem des Anaxagoras: Quadratur des Kreises

Dies ist analog zu dem Problem der Flächenberechnung des Kreises als Summe von Quadraten (=Produkt), das 1882 als unmöglich bewiesen wurde.

Allgemein wird der Wert eines Integrals als eine Summe von Produkten numerisch berechnet. Die numerische Integration ist aus verschiedenen Gründen wichtig: Nicht jede

Funktion kann in geschlossener Form integriert werden, so z.B. die Fehlerfunktion $\text{erf}(x)$, die Gamma-Funktion $\Gamma(x)$ oder die Besselfunktionen. Ebenso wie bei der Differentiation, ist auch die Integration einer Funktion, von der nur Datenpunkte bekannt sind, möglich.

Als ein Anwendungsbeispiel läßt sich die Teilchengrößenverteilung in einem Korngemisch (z.B. Erdreich) nennen, die man durch Sortieren des Ausgangsmaterials mit Sieben verschiedener Maschenweite erhält, Abb. 6.1. Diese Funktion $p(x)$ gibt an, wie groß der Anteil von Körnern des Durchmessers x am Gesamtgemisch ist. Genauer gesagt, ist $p(x)\Delta x$ die Wahrscheinlichkeit, daß ein zufällig ausgewähltes Korn einen Durchmesser im Bereich zwischen x und $x + \Delta x$ aufweist. Die Verteilungsfunktion $P_S = P(x < S)$ gibt an, wieviele Teilchen kleiner als eine bestimmte Größe S sind. Die Funktion P_S erhält man durch numerische Integration aus $p(x)$.

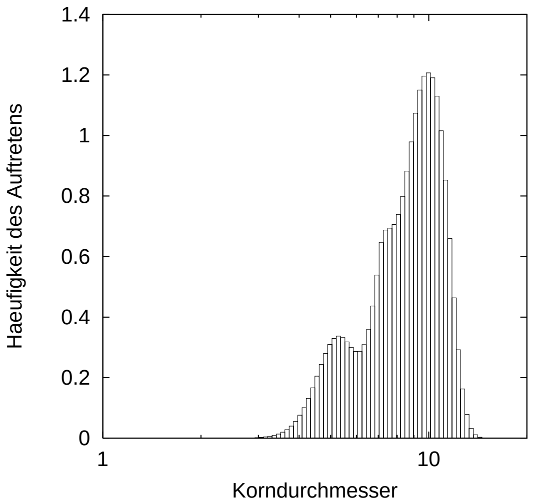

Abbildung 6.1: Beispiel für eine Teilchengrößenverteilung. Aufgetragen ist die Häufigkeit, mit der ein bestimmter Durchmesser vorkommt (in willkürlichen Einheiten), gegen den Durchmesser des Korns (mm).

Im allgemeinen besteht die Aufgabe also darin, $I_{ab} = \int_a^b f(x)\,dx$ numerisch zu berechnen. Drei der einfachsten Integrationsverfahren werden im Folgenden genauer diskutiert. Die Mittelpunktsregel und die Trapezregel

6.2.1 Die Mittelpunktsregel

Im Folgenden sei der Integrationsbereich von a bis b in N Intervalle mit Randpunkten $x_i = a + ih$ $(i = 0, ..., N)$, und Breite $h_i = x_i - x_{i-1}$ unterteilt. Weiterhin bedeutet die Schreibweise $\bar{f}_i = f(\bar{x}_i)$ eine Funktionsauswertung am Punkt $\bar{x}_i = (x_i + x_{i-1})/2$, in der Mitte des Intervalls zwischen x_{i-1} und x_i, sofern die analytische Form von f bekannt ist. Diese Situation ist in Abb. 6.2 zu sehen.

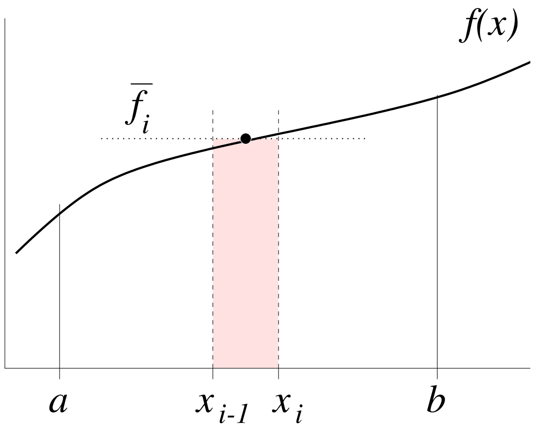

Abbildung 6.2: Schematische Darstellung eines Intervalls, dessen Fläche nach der Mittelpunktsregel durch den Funktionswert im Zentrum des Intervalls approximiert wird.

Damit ist I_{ab} im Fall gleichgroßer Intervalle:

$$I_{ab} = h \sum_{i=1}^{N} \bar{f}_i \ , \tag{6.13}$$

mit $h = h_i = (b - a)/N$, oder bei allgemeinen Intervall-Längen:

$$I_{ab} = \sum_{i=1}^{N} (x_i - x_{i-1}) \ f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) = \sum_{i=1}^{N} h_i \bar{f}_i \ . \tag{6.14}$$

Der Fehler einer Integration ist somit die Differenz zwischen der exakten und der genäherten Lösung:

$$\Delta I_{ab} = \int_a^b f(x)\,dx - h \sum_{i=1}^{N} f(\bar{x}_i) \ , \tag{6.15}$$

wie sich durch Taylorentwicklung von $f(x)$ in kleinem Abstand δ um $\bar{x}_i$:

$$f(x) \quad = \quad f(\bar{x}_i) + \delta f'(\bar{x}_i) + \frac{1}{2}\delta^2 f''(\bar{x}_i) + ... \tag{6.16}$$

zeigen läßt. Setzt man Glg. (6.16) in Glg. (6.15) ein und integriert, jeweils für ein Intervall, von $-h/2$ bis $h/2$ über δ, so sieht man, daß der erste Summand der Taylorreihe mit der Summe in Gleichung (6.13) identisch ist. Der zweite Summand verschwindet, da bei symmetrischer Integration eine zu $\bar{x}_i$ symmetrische Funktion (hier: alle δ mit ungerader Potenz) verschwindet. Damit errechnet sich der Fehler aus Glg. (6.15) zu:

$$\Delta I_{ab} = \frac{1}{2} f''(\bar{x}_i) \int_{-h/2}^{h/2} \delta^2 \, d\delta = \frac{h^2}{24} f''(\bar{x}_i) \ , \tag{6.17}$$

d.h. der Fehler der Mittelpunktsregel ist von 2. Ordnung in h.

6.2.2 Die Trapezregel

Das Trapez, das von den Funktionswerten an den Aufpunkten x_i und x_{i-1} aufgespannt wird hat die Fläche $(f_i + f_{i-1})h_i/2$, womit man ein Integral der Form

$$I_{ab} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} h_i(f_i + f_{i-1}) \tag{6.18}$$

definieren kann. Diese Methode ergibt allerdings ebenfalls einen Fehler der Ordnung h^2. Die Trapezregel ist in Abb. 6.3 gezeichnet.

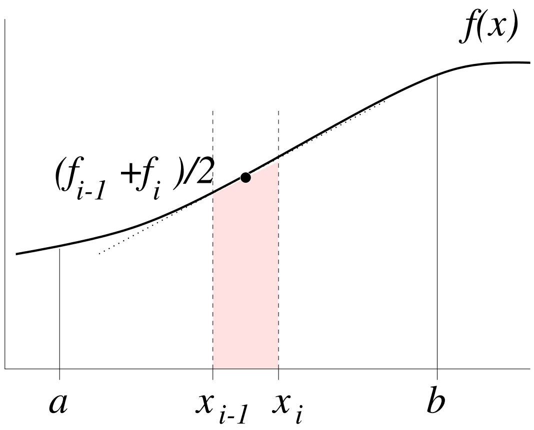

Abbildung 6.3: Schematische Darstellung eines Intervalls, dessen Fläche nach der Trapezregel durch eine Gerade approximiert wird.

6.2.3 Die Simpsonregel

Nun sei ein gewichteter Funktionsmittelwert gegeben als:

$$\hat{f}_i = \frac{1}{6}\left[f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) + f(x_{i-1})\right] \ , \tag{6.19}$$

bzw. die Kurve wird durch eine Parabel angenähert. Diese ist in Abb. 6.4 als gepunktete Linie zu sehen.

Weiterhin kann man zur Vereinfachung konstante Intervallbreiten $h = x_i - x_{i-1}$ annehmen. Das Integral I_{ab} berechnet sich somit zu:

$$I_{ab} = \frac{1}{6}\sum_{i=1}^{N}(x_i - x_{i-1})\left[f(x_i) + 4f(\bar{x}_i) + f(x_{i-1})\right] = h\sum_{i=1}^{N}\hat{f}_i \ . \tag{6.20}$$

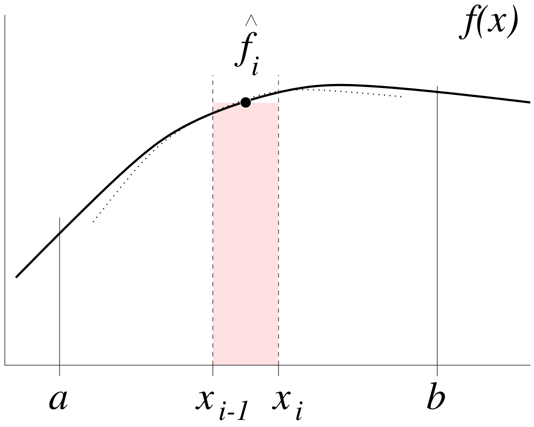

Abbildung 6.4: Schematische Darstellung eines Intervalls, dessen Fläche nach der Simpsonregel durch eine Parabel approximiert wird.

Unter Benutzung der zweiten Ableitung aus Glg. (6.9):

$$f''(\bar{x}_i) = \frac{f(x_i) - 2f(\bar{x}_i) + f(x_{i-1})}{(h/2)^2} = \frac{24}{h^2}\left(\hat{f}_i - f(\bar{x}_i)\right) \tag{6.21}$$

und der Taylorentwicklung von $f(x)$ aus Glg. (6.16), ergibt sich für den Fehler:

$$\begin{aligned} \Delta I_{ab} &= \sum_{i=1}^{N} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx - h\sum_{i=1}^{N} \hat{f}_i \\ &= h\sum_{i=1}^{N}\left[f(\bar{x}_i) + \frac{h^2}{24}f''(\bar{x}_i) + \underbrace{\frac{(h/2)^4}{120}f''''(\bar{x}_i)}_{\Delta I_{x_{i-1}x_i}}\right] \end{aligned}$$

Daraus folgt der Fehler $\Delta_{ab} = (b-a)(h/2)^4 f''''(\bar{x}_i)/120$, d.h. die Ordnung des Fehlers des Simpson-Verfahrens ist 4.

6.3 Gaußsche Quadratur

Bislang wurden die zu integrierenden Funktionen in den vorgegebenen Intervallen wie folgt approximiert:

- Trapezregel: Eine Gerade, d.h. linear
- Simpsonregel: Eine Parabel, d.h. quadratisch

Nun sollen allgemein Funktionen im Intervall $[a, b]$ durch ein Polynom der Ordnung L approximiert werden,

$$f(x) = \sum_{l=0}^{L} \alpha_l \mathcal{P}_l(x) \ , \tag{6.22}$$

wobei die $\mathcal{P}_l(x)$ einen Satz linear unabhängiger Polynome der maximalen Ordnung l (höchste Potenz von x) bilden. Mit dieser Idee wollen wir nun zunächst alle Regeln im Intervall $[x_{i-1}, x_i]$ herleiten. Es sei

$$\begin{aligned} I_{ab} &= \sum_{i=1}^{N} I_{x_{i-1}\,x_i} \qquad (6.23) \\ I = I_{x_{i-1}\,x_i} &= \sum_{k=0}^{L-1} w_i f_i \end{aligned}$$

Den Ausdruck (6.23) nennt man, wie eingangs erwähnt, "Quadratur" (Summe von Produkten). Die x_i nennt man *Integrationsstützstellen* mit den Funktionswerten $f_i = f(x_i)$ und die w_i sind die zugehörigen *Gewichte*.

6.3.1 Lineare Näherung

Für den einfachen Fall $L = 2$ ist also insbesondere

$$I = w_0 f_0 + w_1 f_1 \ . \tag{6.24}$$

Die Quadratur sei nun für die speziellen Funktionen $f(x) = 1$ und $f(x) = x$ exakt. Hieraus folgen zwei Gleichungen, aus denen sich die Gewichte w_i eindeutig bestimmen lassen:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} 1\,dx = x_i - x_{i-1} \stackrel{!}{=} w_0 + w_1 \tag{6.25}$$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} x\,dx = \frac{1}{2}\,(x_i^2 - x_{i-1}^2) \stackrel{!}{=} w_0 x_{i-1} + w_1 x_i \ . \tag{6.26}$$

Koeffizientenvergleich von (6.25) und (6.26) ergibt

$$w_0 = w_1 = \frac{x_i - x_{i-1}}{2} \ , \tag{6.27}$$

und somit das Integral über das Intervall:

$$I_{x_{i-1}\,x_i} = (x_i - x_{i-1})\,\frac{f(x_i) + f(x_{i-1})}{2} \ , \tag{6.28}$$

also die bereits bekannte Trapezregel, siehe Gleichung (6.18).

6.3.2 Quadratische Näherung

Analog ergibt sich für $L = 3$:

$$\begin{aligned} x_i - x_{i-1} &= w_0 + w_1 + w_2 \\ \frac{1}{2}(x_i^2 - x_{i-1}^2) &= w_0 x_{i-1} + w_1 \bar{x}_i + w_2 x_i \\ \frac{1}{3}(x_i^3 - x_{i-1}^3) &= \frac{1}{6}\left[(x_i + x_{i-1})(x_i^2 - x_{i-1}^2) + (x_i - x_{i-1})(x_i^2 + x_{i-1}^2)\right] \\ &= w_0 x_{i-1}^2 + w_1 \bar{x}_i^2 + w_2 x_i^2 \end{aligned}$$

Lösung des Gleichungssystems ergibt:

$$\begin{aligned} w_0 = w_2 &= \frac{1}{6}(x_i - x_{i-1}) \\ w_1 &= \frac{4}{6}(x_i - x_{i-1}) \end{aligned}$$

und somit die Simpsonregel, siehe Gleichung (6.20):

$$I_{x_{i-1},x_i} = (x_i - x_{i-1})\frac{1}{6}\left[f(x_i) + 4f(\bar{x}_i) + f(x_{i-1})\right] \ . \tag{6.29}$$

6.3.3 Beliebige Stützstellen

Bei dem Verfahren nach Gauß geht man ähnlich vor, allerdings werden neben den Gewichten w_i auch die Stützstellen x_i im Intervall $[a, b]$ als Parameter frei wählbar gelassen.

Die Vorgehensweise ist folgende:

1. Forme ein Integral über x' durch Substitution $x' = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}y$ auf ein im Intervall $[-1, 1]$ definiertes, bestimmtes Integral um. Das Integral ist dann:

$$I_{ab} = \int_a^b f(x')\,dx' = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}y\right)\,dy = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx. \tag{6.30}$$

   Es reicht also aus, unsere Betrachtungen im Folgenden auf Integrale über das Intervall $[-1, 1]$ zu beschränken.

2. Betrachten wir nun eine fest vorgegebene Anzahl von Stützstellen, etwa $L = 2$, dann ist

$$I = I_{-1\ 1} = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) \ , \tag{6.31}$$

   wobei sowohl die Stützstellen x_1 und x_2 als auch die Gewichte w_1 und w_2 als Unbekannte zu betrachten sind.

3. Zur Bestimmung dieser vier Unbekannten setzen wir in (6.31) $f(x) = 1$, x, x^2, und x^3 ein. Das heißt, wir benutzen vier Polynome verschiedenen Grades, um die vier Bestimmungsgleichungen zu erhalten (*beachte* : $a = -1$, $b = 1$):

$$(b-a) = 2 = w_1 + w_2 \tag{6.32}$$

$$\frac{1}{2}(b^2 - a^2) = 0 = w_1 x_1 + w_2 x_2 \tag{6.33}$$

$$\frac{1}{3}(b^3 - a^3) = \tfrac{2}{3} = w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 \tag{6.34}$$

$$\frac{1}{4}(b^4 - a^4) = 0 = w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3 \tag{6.35}$$

Einsetzen von (6.33) in (6.35) liefert $x_1^2 = x_2^2$ und damit $x_1 = -x_2$, wenn man fordert, daß die Stützstellen verschieden sein sollen. Unter Benutzung von (6.32), (6.33) und (6.34) ergibt sich dann:

$$w_1 = w_2 = 1 \quad \text{und}: \ x_1^2 = \frac{1}{3} \Rightarrow x_{1,2} = \pm\frac{1}{\sqrt{3}} \tag{6.36}$$

Die $x_{1,2}$ sind die gesuchten Stützstellen – sie liegen symmetrisch zum Ursprung; jedes solches Stützstellenpaar besitzt auch nur ein zugehöriges Integrationsgewicht. Diese Symmetrie ist letztlich eine Folge der Tatsache, daß $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} f(-x)\,dx$, siehe Glg. (6.31) für $f(x)$ und $f(-x)$.

6.3.4 Legendre-Polynome

Zurück zu den Polynomen $\mathcal{P}_l(x) = a_0 + a_1 x + ... + a_l x^l$ (Polynome l-ter Ordnung). Wir wollen jetzt fordern, daß diese im Intervall $[-1, 1]$ orthogonal zueinander sein sollen, d.h.:

$$\int_{-1}^{1} \mathcal{P}_k(x)\mathcal{P}_l(x)\,dx = \delta_{kl} \ . \tag{6.37}$$

Die einfachsten Polynome 1, x, x^2 und x^3 erfüllen diese Forderung jedoch nicht; stattdessen benötigt man die sog. *Legendre-Polynome*:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}, \ \sqrt{\frac{3}{2}}x, \ \sqrt{\frac{5}{2}}\frac{3x^2-1}{2}, ... \tag{6.38}$$

Die Frage ist: wie beschafft man sich die $\mathcal{P}_l(x)$?

Seien die $\mathcal{P}_k(x)$ mit $k \leq l-1$ bekannt, benutzt man den Ansatz $\mathcal{P}_l(x) = a_0 + a_1 x + ... + a_l x^l$. Die Orthogonalitätsbedingungen liefern zusammen mit der Normierungsforderung die Gleichung (6.37). Damit hat man $l+1$ Bestimmungsgleichungen für ebensoviele Koeffizienten $a_0 \dots a_l$ ("Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren").

Bemerkung:
Ein Legendre-Polynom $\mathcal{P}_l(x)$ von l-ter Ordnung besitzt l Nullstellen in $[-1,1]$, siehe Ref. [6.1].

Wie oben soll das Integral einer Funktion $f(x)$ durch Auswertung an bestimmten Stützstellen x_i und Aufsummation mit Gewichten w_i approximiert werden:

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{N} w_i f(x_i)\ . \tag{6.39}$$

Man hat dabei $2N$ Unbekannte: w_i, x_i, $(i = 1...N)$.

Ein allgemeines Lösungsverfahren für dieses Problems läßt sich folgendermaßen beschreiben: Die Gleichung sei exakt für ein beliebiges Polynom $f(x) = q_{2N-1}(x)$ der Ordnung $2N-1$ und somit $2N$ freien Parametern. Man kann dies umschreiben zu:

$$q_{2N-1}(x) = q_{N-1}(x)\mathcal{P}_N(x) + r_{N-1}(x)\ . \tag{6.40}$$

Dabei ist P_N ein Legendre-Polynom von Grad N und q_{N-1} bzw. der Rest r_{N-1} sind Polynome der Ordnung $N-1$. Diese Darstellung erhält man durch Polynomdivision von $q_{2N-1}(x)/\mathcal{P}_N(x)$. Es folgt nun aus den Eigenschaften der Legendre-Polynome:

1. Da sich jedes Polynom k-ter Ordnung durch eine Linearkombination von Legendre-Polynome bis zu einschließlich k-ter Ordnung darstellen läßt,

   $$q_k(x) = \sum_{i=0}^{k} a_i \mathcal{P}_i(x)\ , \tag{6.41}$$

   folgt direkt:

   $$\int_{-1}^{1} \mathcal{P}_l(x) q_k(x)\,dx = \sum_{i=0}^{k} a_i \int_{-1}^{1} \mathcal{P}_l(x)\mathcal{P}_i(x)\,dx = 0\ , \tag{6.42}$$

   denn $i < l$, siehe Gleichung (6.37).

2. Weiterhin ist auch:

   $$\int_{-1}^{1} 1 \cdot \mathcal{P}_l(x)\,dx = 0, \tag{6.43}$$

   falls $l > 0$, siehe Gleichung (6.37).

3. Da $\mathcal{P}_l(x)$ im Intervall $[-1,1]$ genau l Nullstellen hat (Beweis siehe z.B. Ref. [6.1]) folgt aus Glg. (6.40):

$$I = \underbrace{\int_{-1}^{1} q_{2N-1}(x)\,dx}_{(I)} = \underbrace{\int_{-1}^{1} q_{N-1}(x)\mathcal{P}_N(x)\,dx}_{(II)} + \underbrace{\int_{-1}^{1} r_{N-1}(x)\,dx}_{(III)} \tag{6.44}$$

Der Ausdruck (II) ist zufolge Gleichung (6.42) identisch Null:

$$\int_{-1}^{1} q_{N-1}(x)\mathcal{P}_N(x)\,dx \;=\; \sum_{i=1}^{N} w_i q_{N-1}(x_i)\mathcal{P}_N(x_i) = 0$$

Damit das auch für die diskrete Integrationsformel noch so ist, müssen die x_i die Nullstellen des Polynoms $\mathcal{P}_N(x_i) = 0$ sein. Diese Nullstellen sind in Werken wie Abramovitz and Stegun [6.2] aufgelistet oder lassen sich mit Standardprogrammen (Maple) bestimmen. Die x_i sind außerdem paarweise symmetrisch zu Null.

Hat man die Stützstellen x_i bestimmt, so kann man das sog. *Lagrange-Polynom*

$$L_k(x) = \Pi_{j=1,j\neq k}^{N}\left(\frac{x - x_j}{x_k - x_j}\right) , \tag{6.45}$$

vom Grad $N-1$ ansetzen, das die Bedingung $L_k(x_j) = \delta_{kj}$ erfüllt; d.h. das Lagrange-Polynom $L_k(x_j)$ verschwindet an allen Stützstellen x_j mit $j \neq k$, an der Stützstelle x_k hat es den Wert $L_k(x_k) = 1$.

Setzt man an die Stelle von $q_{2N-1}(x)$ eine der N Funktionen $L_k^2(x)$, so folgt aus den Gleichungen (6.39) und (6.44) das Gewicht:

$$w_k = \sum_{i=1}^{N} w_i L_k^2(x_i) = \int_{-1}^{1} L_k^2(x)dx > 0 , \tag{6.46}$$

welches mit bekannten Stützstellen analytisch zu lösen ist.

Zusammenfassend gilt für allgemeines $f(x)$:

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} w_i f(x_i) , \tag{6.47}$$

wobei die x_i die Nullstellen des *Legendre-Polynoms* $\mathcal{P}_N(x)$ sind, und sich die Gewichte w_k aus Gleichung (6.46) als Integral über das quadrierte *Lagrange-Polynom* $L_k(x)$ ergeben. Das "Ungefähr Gleich" $\approx$-Zeichen wird zur Gleichheit, wenn $f(x)$ ein Polynom maximal $2N$-ten Grades ist.

In Tabelle 6.1 sind die Stützstellen und Gewichte bis zur Ordnung $N = 5$ nach Ref. [6.1] aufgeführt. Der Fall $N = 2$ entspricht der im vorigen Abschnitt durchgeführten Berechnung, siehe Gleichung (6.36).

$N=2$	$x_{1,2} = \pm\frac{1}{\sqrt{3}}$	$w_{1,2} = 1$
$N=3$	$x_{1,3} = \pm\sqrt{\frac{3}{5}}$ $x_2 = 0$	$w_{1,2} = \frac{5}{9}$ $w_0 = \frac{8}{9}$
$N=4$	$x_{1,4} = \pm 0.8611363116$ $x_{2,3} = \pm 0.3399810436$	$w_{1,4} = 0.3478548451$ $w_{2,3} = 0.6521451549$
$N=5$	$x_{1,5} = \pm 0.9061798459$ $x_{2,4} = \pm 0.5384693101$ $x_3 = 0$	$w_{1,5} = 0.2369268851$ $w_{2,4} = 0.4786286705$ $w_3 = 0.5688888889$

Tabelle 6.1: Stützstellen x_i und Gewichte w_i der Gaußschen Quadratur.

6.3.5 Weiterführende Literatur

[6.1] Hans Rudolf Schwarz. *Numerische Mathematik*. B. G. Teubner, Stuttgart, Germany, 1986.

[6.2] M. Abramovitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York, 1972.

6.4 Monte-Carlo Integration

Der Name Monte-Carlo Integration kommt von dem Zufallscharakter der im Folgenden beschriebenen Methode, bzw. vom berühmten Casino in Monacco. Es handelt sich um ein Verfahren, bei dem die Zufallszahlen aus Abschnitt 5.1 Verwendung finden.

Der einfachste Fall eines höherdimensionalen Integrals ist:

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)dxdy = \int_{V^D} f(\mathbf{r})d\mathbf{r} \ , \tag{6.48}$$

die Integration über ein Rechteck. Bei erwünschter Genauigkeit ist die Anzahl der Stützstellen z.B. N^D (d.h. $N = 100$ Stützstellen in einer Dimension, $D = 1$, 10^4 Stützstellen für $D = 2$ und 10^6 in 3D! Der numerische Aufwand wird also mit zunehmender Dimension enorm groß. Dies trifft umsomehr zu wenn der Rand des Integrationsbereichs kein Rechteck sondern ein beliebiger Körper ist. Für $D > 1$ existiert auch ein Gauß-Legendre-Verfahren, aber wenigstens für $D \geq 4$ ist die Monte-Carlo-Methode zu bevorzugen.

6.4.1 Berechnung der Zahl π

Das einfachste Anwendungsbeispiel ist die Berechnung der Fläche eines Kreises vom Radius $R = 1$, d.h. anders ausgedrückt, mit:

$$I = \int_{r \leq R} d\mathbf{r} = \pi \ , \tag{6.49}$$

die Berechnung von π. Hierzu werfen wir zufällig und homogen verteilt Punkte in ein Quadrat, welches das zu integrierende Gebiet (hier einen Kreis) enthält. Wenn der Punkt $\mathbf{r} = (x, y)$ innerhalb des Kreises liegt wird er zum Integral gezählt, liegt er außerhalb wird der Versuch verworfen.

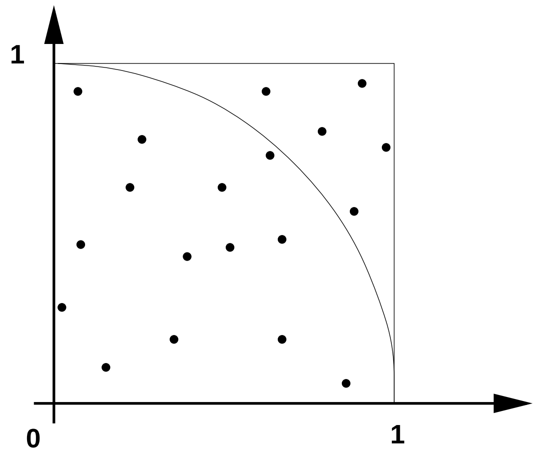

Abbildung 6.5: Geometrie zur Bestimmung von π durch Monte-Carlo Integration.

Der Zufallszahlengenerator sei `rand()`, der Werte im Intervall $[0, 1[$ liefert wenn man die `int`-Zufallszahl durch die Periode `RAND_MAX` teilt. Dann ist eine mögliche Implementierung:

```
#include<iostream>
#include<iomanip>
using std::cout;
using std::cin;
using std::setprecision;

const static long int romax=RAND_MAX;

int main()
{
   double r0, r1;
   int pint=0;                    // integration sum
```

```
   int iout=2, ic=iout;          // output delay
   int iprec=16;                 // precision
   int iseed=5;
   srand( iseed );               // set seed only once !

   for( int i=1; i<=100000000; i++ ){
      ic+=1;
      r0=float(rand())/romax;    // draw x, first random number
      r1=float(rand())/romax;    // draw y, second random number
                                 // check if inside the circle
      if( r1*r1+r0*r0 <= 1.E0 ) pint+=1;
      if( ic > iout ){
         cout << setprecision(iprec);
         cout << i << ' ' << M_PI << ' ' << 4.*double(pint)/i << '\n';
         ic=1;
         iout=iout*2;
      }
   }
   return 0;
}
```

Der Anteil der Punkte, die in den Kreis fallen, sollte gleich dem Anteil der gesuchten Fläche an dem umgebenden Quadrat sein. Für den oben betrachteten Viertel-Kreis mit Radius $R = 1$, sollte der Anteil gleich $I/4 = \pi/4(\approx 0.785)$ sein. Das Programmbeispiel gibt sowohl π als auch den numerisch berechneten Näherungswert I aus.

Das Ergebnis I eines typischen Programmdurchlaufes ist in Abbildung 6.6 als Funktion der Iterationen i für verschiedene Zufallszahlen-Initialisierungen dargestellt.

Der Fehler der Monte-Carlo Methode ist rein statistisch; das Resultat I_i nach i Iterationen wurde als Mittelwert von i Versuchen mit Ergebnis f_j ermittelt als $I_i = (1/i)\sum_{j=1}^{i} f_j$. Die f_j sind um den Mittelwert $\bar{I} = \pi$ zufällig verteilt mit einer Standardabweichung von

$$\sigma_i = \sqrt{(1/i)\sum_{j=1}^{i}(f_j - \bar{I})^2} \; . \tag{6.50}$$

Der statistische Fehler nach i Iterationen ist dann

$$\Delta_i = \sigma_i/\sqrt{i-1} \; . \tag{6.51}$$

Nimmt man nun an, daß die Standardabweichung nicht von der Anzahl der Versuche i abhängt, wie es in der Regel für große i der Fall ist, so folgt sofort daß sich der Fehler verhält wie:

$$\Delta_i \propto i^{-1/2} \tag{6.52}$$

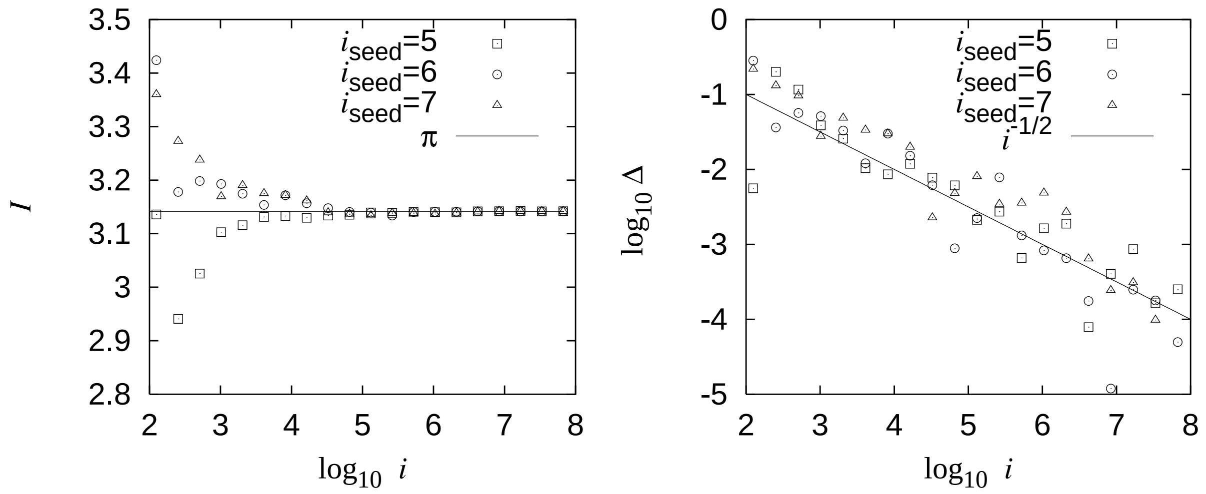

Abbildung 6.6: (Links) Näherungswert I für π, ermittelt mit dem Programm im Text für verschiedene i und drei verschiedene Folgen von Zufallszahlen. Zum Vergleich ist π als horizontale Line eingezeichnet. Die horizontale Achse ist logarithmisch. (Rechts) Fehler $\Delta = \sqrt{(I_i - \pi)^2}$ als Funktion der Iterationen i. Hier sind beide Achsen logarithmisch. Die durchgezogene Linie entspricht der Funktion $\sqrt{i}$.

was auch in Abbildung 6.6 zu sehen ist. Anders ausgedrückt muß man mit dieser Methode vier mal länger integrieren, um den statistischen Fehler auf die Hälfte zu reduzieren. Man beachte, daß Δ_i unabhängig von der Dimension D des Integrals ist.

Bei der Trapezregel findet man z.B. durch Aufteilung des Integrationsvolumens in N Hyperwürfelchen mit der Seitenlänge $h \propto N^{-(1/D)}$, in D Dimensionen, daß sich der Fehler wie $\Delta \propto N^{-(2/D)}$ verhält. In einer Dimension erzielt man also durch Intervallhalbierung eine Reduzierung des Fehlers um den Faktor vier! In Dimensionen $D > 4$ erzielt man jedoch mit der Monte-Carlo-Methode asymptotisch ein besseres Ergebnis! Entsprechende Aussagen mit jeweils anderen Dimensionszahlen lassen sich für alle Verfahren mit fester Fehlerordnung und mit äquidistanten Stützstellen finden.

6.4.2 Berechnung höherdimensionaler Integrale

Bei allgemeinen Funktionen $f(\mathbf{x})$ führt man am besten zunächst eine Variablensubstitution durch, um die Zufallszahlen direkt verwenden zu können, d.h. man ersetzt die Variable x_i', über die im Intervall $[a_i, b_i]$ inegriert werden soll, durch eine Variable

$$x_i = \frac{x_i' - a_i}{b_i - a_i} \tag{6.53}$$

Der Teil des Integrals über x_i ist dann:

$$I_i = \int_{a_i}^{b_i} f(x_i')dx_i' = (b_i - a_i) \int_0^1 f(x_i)\, dx_i \approx \frac{b_i - a_i}{N} \sum_{j=1}^{N} f_j \ , \tag{6.54}$$

wobei natürlich auch die Funktion $f(x_i')$ durch die transformierte Funktion $f(x_i)$ ersetzt werden muß. Als Beispiel wird $f(x_i') = x_i'^2 + 1$ durch $f(x_i) = [(b_i - a_i)x_i + a_i]^2 + 1$ ersetzt. Die Summe bezeichnet dabei N zufällige Funktionsauswertungen f_j an N Stellen $x_j \in [0, 1]$.

In D Dimensionen sieht ein Integral über einen Hyperkubus dann folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned} I &= \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} ... \int_{a_D}^{b_D} f(\mathbf{x})\, dx_1 dx_2 ... dx_D \\ &= \frac{(b_1 - a_1)(b_2 - a_2)...(b_D - a_D)}{N} \sum_{j=1}^{N} f(\mathbf{x}_j) \ . \end{aligned}$$

Hat man Funktionen, die stark schwanken oder nicht im gesamten Gebiet "glatt" sind (z. B. weil sie eine Singularität besitzen), so ist das sogenannte "Importance sampling"-Verfahren zu empfehlen. Dabei geht man wie bei der normalen Monte-Carlo-Methode vor, gewichtet allerdings die Verteilung der Zufallszahlen so, daß die "Unebenheiten" der Funktion berücksichtigt werden. Würde man das z.B. bei einer schmalen Gaußkurve nicht tun, so würden die hohen Werte unverhältnismäßig selten besucht, was einen starken Verlust an Genauigkeit zur Folge hätte. Man definiere eine Gewichtungsfunktion $w(x)$, die so normiert ist, daß $\int_0^1 w(x)\, dx = 1$ ist. Man kann das Integral nun umschreiben:

$$I = \int_0^1 w(x) \frac{f(x)}{w(x)}\, dx = \int_0^1 \frac{f(x(y))}{w(x(y))}\, dy = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{f(x(y_j))}{w(x(y_j))} \ , \tag{6.55}$$

wobei die Transformation $dy = w(x)dx$ mit $y(0) = 0$ und $y(1) = 1$ verwendet wurde. Diese Methode bedarf allerdings einer Funktion $w(x)$, die so integriert werden kann, daß man die Werte $x(y_j)$ einfach berechnen kann. Gleichzeitig sollte die Funktion $w(x)$ sich ähnlich verhalten wie $f(x)$, damit der Quotient $f(x)/w(x)$ im gesamten Integrationsbereich möglichst konstant bleibt.

Mit der Monte-Carlo-Methode sind damit auch die Integration von Funktionalintegralen, Pfadintegralen und Zustandssummen möglich, so daß sie ein breites Anwendungsgebiet in der Physik besitzt.