


Gitterpunkt-Integrationsformeln

Ulrich Telle

 FernUniversität Hagen, Fachbereich Mathematik
Lehrgebiet Numerische Mathematik, Prof. Dr. F. Locher

Mathematisches Praktikum 1074

18./19.02.2005

Gliederung von Teil I

- 1 Numerische multivariate Integration
 - Einführung
 - Integrationsverfahren

- 2 Gitterpunkt-Formeln
 - Definition
 - Fehlerabschätzung
 - Gütekriterien
 - Zusammenfassung

Gliederung von Teil II

- 3 Integrationsframework
 - Eigenschaften
 - Programmaufbau
 - Besonderheiten

- 4 Testergebnisse
 - Einflüsse auf die Genauigkeit
 - Genz-Test
 - Zusammenfassung
 - Vorführung

Teil I

Mathematische Grundlagen

Einsatzgebiete multivariater Integration

- Wahrscheinlichkeitstheorie
- Statistische Mechanik
- Quantenphysik
- Finanzmathematik
- ...

Formale Definition der Problemstellung

Definition

Das s -dimensionale Integral über dem Einheitswürfel

$C^s = [0, 1]^s$:

$$If = \int_{C^s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(x_1, \dots, x_s) dx_1 \cdots dx_s$$

Allgemeinere Integrale ggf. mittels linearer Transformationen in obige Form überführen.

Allgemeine Integrationsformel

Definition

Eine Näherungsformel für s -dimensionale Integrale wird – in Anlehnung an die bekannten Integrationsformeln für eindimensionale Integrale – definiert als

$$Q_N f = \sum_{j=0}^{N-1} \omega_j f(\mathbf{x}_j) \quad \text{mit } \mathbf{x}_j \in C^s$$

Die Zahl N wird **Ordnung** der Integrationsformel genannt.

Fluch der Dimension

Rechenaufwand klassischer numerischer Integrationsverfahren steigt exponentiell mit der Dimension des Problems.

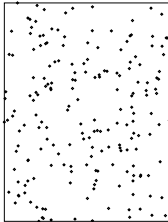


Suche nach Verfahren, deren Konvergenzordnung von der Dimension möglichst unabhängig ist.

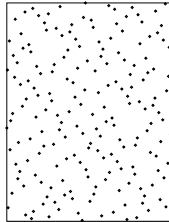
Methoden, den Fluch der Dimension zu brechen

- Monte-Carlo-Verfahren
- Quasi-Monte-Carlo-Verfahren
- Gitterpunkt-Formeln
- Dünngitter-Verfahren

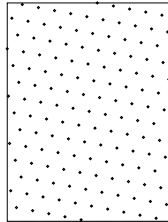
Beispiele für Stützstellenmengen



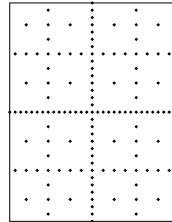
(a) Monte-Carlo



(b) Quasi-Monte-Carlo



(c) Gitterpunkt-Formel



(d) Dünngitter

Voraussetzung

- Univariate Integrationsformeln nicht ohne weiteres auf den multivariaten Fall verallgemeinerbar.
- Verallgemeinerung der eindimensionalen Rechteckregel konstruierbar, falls der Integrand f **eins-periodisch** in **jeder** Komponente ist:

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x} + \mathbf{z}) \quad \forall \mathbf{z} \in \mathbb{Z}^s \text{ und } \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^s$$

Verallgemeinerung der Rechteckregel (1)

Bekanntlich lautet die eindimensionale Rechteck-Regel

$$R_n f = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} f\left(\frac{j}{n}\right)$$

Da der Integrand f als eins-periodisch vorausgesetzt wird, handelt es sich genau genommen sogar um die Trapez-Regel

$$T_n f = \frac{1}{2n} f(0) + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n-1} f\left(\frac{j}{n}\right) + \frac{1}{2n} f(1)$$

Verallgemeinerung der Rechteckregel (2)

- Naive Verallgemeinerung:

$$R_{n^s} f = \frac{1}{n^s} \sum_{j_1=0}^{n-1} \cdots \sum_{j_s=0}^{n-1} f\left(\frac{j_1}{n}, \dots, \frac{j_s}{n}\right)$$

- Interessantere Verallgemeinerung:
Methode der guten Gitterpunkte der Zahlentheoretiker
Korobov und Hlawka

$$Qf = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f\left(\frac{j}{N} \mathbf{z}\right) \quad \text{mit festem } \mathbf{z} \in \mathbb{Z}^s$$

Integrationsgitter

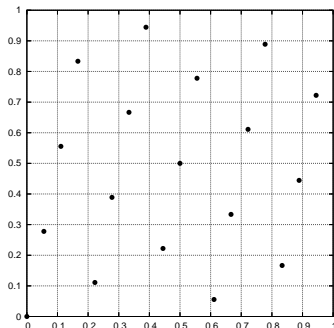
Definition

Eine diskrete Teilmenge des \mathbb{R}^s heißt **Integrationsgitter** L , falls

- 1 Wenn x_1 und x_2 zu L gehören, dann gehören auch $x_1 + x_2$ und $x_1 - x_2$ zu L ,
- 2 L enthält s linear unabhängige Punkte,
- 3 0 ist ein isolierter Punkt von L , d.h., es gibt eine Umgebung von 0 , deren Durchschnitt mit L nur 0 enthält und
- 4 es gilt $Z^s \subseteq L$.

⇒ Jedes Gitter L bildet diskrete additive Untergruppe des \mathbb{R}^s

Beispiel eines Integrationsgitters



Integrationsgitter im \mathbb{R}^2 nach der
Methode der guten Gitterpunkte
mit

$$N = 18$$

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Abszissenmenge $A(L) = L \cap C^2$

Herleitung einer Fehlerformel (1)

- Integrand f in seine Fourier-Reihe entwickeln:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{h} \in \mathbb{Z}^s} \hat{f}(\mathbf{h}) e^{2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}} \quad \text{mit} \quad \hat{f}(\mathbf{h}) = \int_{C^s} e^{-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

- Einsetzen der Fourier-Reihe in die Gitterpunkt-Formel

$$Qf = \sum_{\mathbf{h} \in \mathbb{Z}^s} \hat{f}(\mathbf{h}) Qe^{2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}}$$

Herleitung einer Fehlerformel (2)

- Für alle $\mathbf{h} \in \mathbb{Z}^s$ gilt

$$Qe^{2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \mathbf{h} \in L^\perp \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

wobei L^\perp das **duale Gitter** zum Integrationsgitter L ist:

$$L^\perp = \{\mathbf{h} \in \mathbb{R}^s \mid \mathbf{h} \cdot \mathbf{x} \in \mathbb{Z} \quad \forall \mathbf{x} \in L\}$$

Herleitung einer Fehlerformel (3)

- Wegen $If = \hat{f}(\mathbf{0})$ gilt für den Integrationsfehler

$$Qf - If = \sum_{\mathbf{h} \in L^{\perp} \setminus \mathbf{0}} \hat{f}(\mathbf{h})$$

⇒

Q so konstruieren, dass möglichst viele Basisfunktionen $e^{2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}}$, für die $\hat{f}(\mathbf{h})$ „groß“ ist, auf Null abgebildet werden.

Korobov-Räume

Definition

Für $c > 0$ und ein festes $\alpha > 1$ sei $E_s^\alpha(c)$ die Klasse der Funktionen f , deren Fourier-Koeffizienten der Ungleichung

$$|\hat{f}(\mathbf{h})| \leq \frac{c}{(\bar{h}_1 \bar{h}_2 \cdots \bar{h}_s)^\alpha}$$

genügen, wobei $\bar{h} = \max(1, |h|)$ ist. Die Funktionenräume $E_s^\alpha(c)$ bezeichnet man als **Korobov-Räume**.

Hinreichende Bedingung für $f \in E_s^\alpha(c)$

Satz (bewiesen von Zaremba)

Falls $\alpha > 1$ eine ganze Zahl ist und f eine eins-periodische Funktion auf \mathbb{R}^s , deren partielle Ableitungen

$$\frac{\partial^{q_1 + \dots + q_s} f}{\partial x_1^{q_1} \dots \partial x_s^{q_s}}, \quad 0 \leq q_k \leq \alpha - 1, \quad 1 \leq k \leq s$$

existieren und stetig auf C^s sind, dann existiert ein $c > 0$, so dass $f \in E_s^\alpha(c)$ gilt.

Schranke für den Integrationsfehler

Für Funktionen $f \in E_s^\alpha(c)$ gilt

$$|Q(\mathbf{z}, N)f - If| \leq c \sum_{\mathbf{h} \in L^\perp \setminus \mathbf{0}} \frac{1}{(\bar{h}_1 \bar{h}_2 \cdots \bar{h}_s)^\alpha} = cP_\alpha(\mathbf{z}, N).$$

Für $\alpha > 1$ sei die Funktion $f_\alpha \in E_s^\alpha(c)$ definiert als

$$f_\alpha(\mathbf{x}) := \sum_{\mathbf{h} \in \mathbb{Z}^s} \frac{1}{(\bar{h}_1 \bar{h}_2 \cdots \bar{h}_s)^\alpha} e^{2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}},$$

dann tritt in der Abschätzung Gleichheit ein für $f = cf_\alpha$.

Güte einer Gitterpunkt-Formel

Wegen $lf_\alpha = 1$ gilt $P_\alpha(\mathbf{z}, N) = Q(\mathbf{z}, N)f_\alpha - 1$.

Daraus folgt:

Eine Gitterpunkt-Formel der Ordnung N ist **optimal**,
wenn der Integrationsfehler für f_α **minimal** ist.

Praktische Berechnung von $P_\alpha(\mathbf{z}, N)$

f_α lässt sich als Produkt von Funktionen einer einzigen Variablen ausdrücken:

$$f_\alpha(\mathbf{x}) = \prod_{k=1}^s F_\alpha(x_k) \quad \text{mit} \quad F_\alpha(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{2\pi i hx}}{h^\alpha} = 1 + \sum_{h \neq 0} \frac{e^{2\pi i hx}}{|h|^\alpha}$$

Falls α gerade ganze Zahl ist, lässt sich F_α mit Hilfe von Bernoulli-Polynomen ausdrücken:

$$F_\alpha(x) = 1 - (-1)^{\frac{\alpha}{2}} \frac{(2\pi)^\alpha B_\alpha(x)}{\alpha!}$$

Für $\alpha = 2$ ergibt sich z.B. $F_2(x) = 1 + 2\pi^2(x^2 - x + \frac{1}{6})$.

Konvergenzverhalten von Gitterpunkt-Formeln

Fundamentales Konvergenzresultat von Niederreiter:

$$P_\alpha(Q_N) \leq d(s, \alpha) \frac{(\log N)^{c(s, \alpha)}}{N^\alpha}$$

Daraus folgt $|Q_N f - I f| = \mathcal{O}\left(\frac{(\log N)^c}{N^\alpha}\right)$ für $N \rightarrow \infty$.

Konvergenzordnung von Gitterpunkt-Formeln – zumindest theoretisch – nicht vom *Fluch der Dimension* betroffen, da $(\log N)^c = \mathcal{O}(N^\alpha)$ für $N \rightarrow \infty$.

Bestimmung guter Gitterpunkte

- Für gegebene Werte $\alpha > 1$, N und s Vektor \mathbf{z} finden, der $P_\alpha(\mathbf{z}, N)$ minimiert.
- N^s Möglichkeiten für \mathbf{z} , da jede Komponente von \mathbf{z} die Werte von 1 bis N annehmen kann.
- In der Praxis meist Einschränkung auf Vektoren \mathbf{z} bestimmter Form. Gebräuchlichste Form:

Korobov-Form

$$\mathbf{z}(\ell) = (1, \ell, \ell^2 \bmod N, \dots, \ell^{s-1} \bmod N), \quad 1 \leq \ell < N, N \text{ prim}$$

Randbedingungen für effektiven Einsatz

- Integrationsgebiet C^s
- Integrand eins-periodisch in **jeder** Komponente
- Integrand aus $E_s^\alpha(c)$
- Optimales Integrationsgitter

Teil II

Programmbeschreibung

Funktionalität

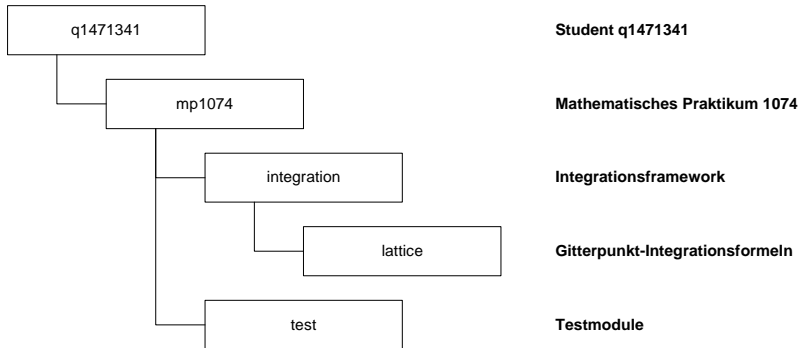
- Numerische Integration ein- oder mehrdimensionaler Integranden
- Einheitliche Schnittstelle und Steuerung
- Überwachung von Terminierungskriterien
 - Absolute oder relative Toleranz
 - Anzahl Auswertungen der Integrandenfunktion
 - Rechenzeit

Implementierte Verfahren

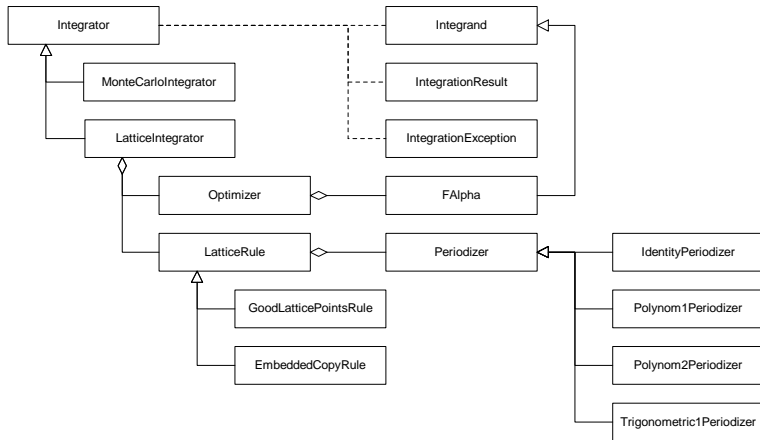
- Monte-Carlo-Verfahren: $Qf = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f(\mathbf{x}_j)$
- Methode der guten Gitterpunkte: $Qf = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f\left(\frac{j}{N}\mathbf{z}\right)$
- Methode der eingebetteten Gitterpunkt-Formel:

$$Q_s f = \frac{1}{2^s m} \sum_{k_s=0}^{n-1} \cdots \sum_{k_1=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m-1} f\left(\frac{j}{m}\mathbf{z} + \frac{(k_1, \dots, k_s, 0, \dots, 0)}{n}\right)$$

Package-Struktur



Klassendiagramm



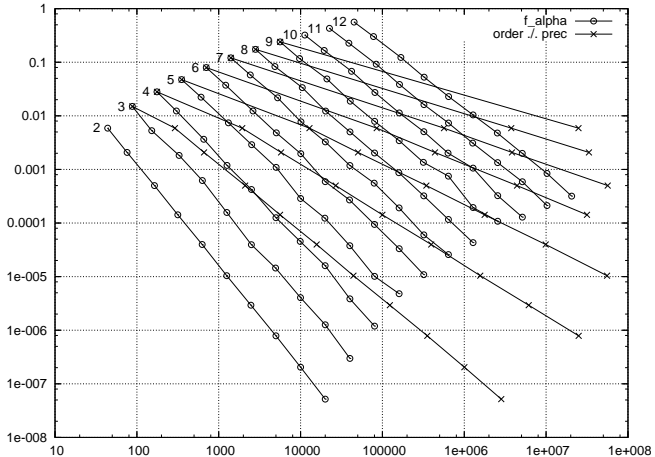
Periodisierung nicht-periodischer Integranden

- Identität $\phi(t) = t$
- Polynomial Typ 1 $\phi(t) = 3t^2 - 2t^3$
- Polynomial Typ 2 $\phi(t) = t^3(10 - 15t + 6t^2)$
- Trigonometrisch $\phi(t) = t - \frac{1}{2\pi} \sin 2\pi t$

Schätzung des Integrationsfehlers

- Monte-Carlo-Verfahren
 - Bestimmung der Standardabweichung mit üblichen statistischen Methoden mit geringem Aufwand
- Methode der guten Gitterpunkte
 - Bestimmung der Standardabweichung durch Randomisierung mit deutlich erhöhtem Rechenaufwand
- Methode der eingebetteten Gitterpunkt-Formel
 - Bestimmung der Standardabweichung aus der Folge der eingebetteten Gitterpunkt-Formeln mit minimalem Zusatzaufwand

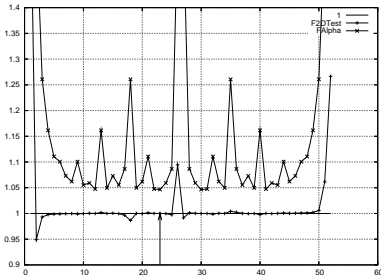
Dimension und Ordnung



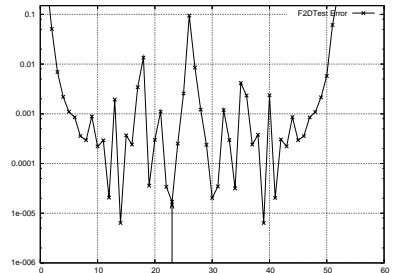
Generierungsvektor

Dimension: 2, Ordnung: 53

Generierungsvektor: $\mathbf{z} = (1, \ell)$ für $\ell = 1, 2, \dots, 52$



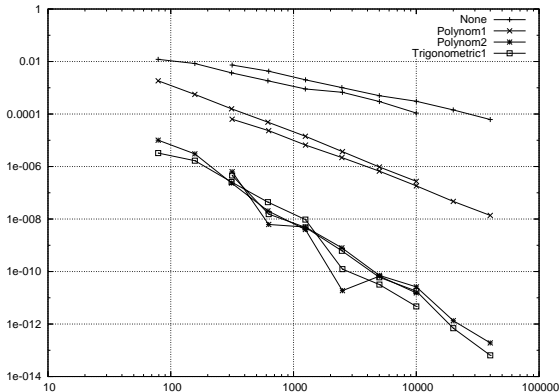
Näherungen für das Integral abhängig von ℓ



Integrationsfehler abhängig von ℓ

Periodisierung

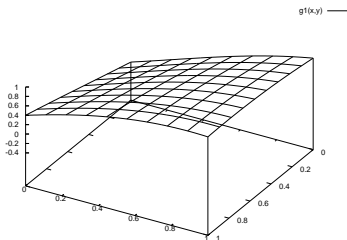
$$f(x, y) = (e - 2)^{-1} ye^{xy}$$



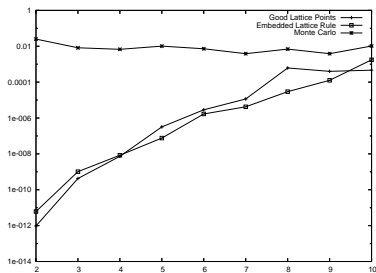
Integranden-Familien

1. OSZILLATORISCH $f^{(1)} = \cos \left(2\pi w_1 + \sum_{i=1}^s c_i x_i \right)$
2. PRODUKT-HÖCHSTWERT $f^{(2)} = \prod_{i=1}^s (c_i^{-2} + (x_i - w_i)^2)^{-1}$
3. ECKEN-HÖCHSTWERT $f^{(3)} = \left(1 + \sum_{i=1}^s c_i x_i \right)^{-(s+1)}$
4. NORMALVERTEILT $f^{(4)} = \exp \left(- \sum_{i=1}^s c_i^2 (x_i - w_i)^2 \right)$
5. KONTINUIERLICH $f^{(5)} = \exp \left(- \sum_{i=1}^s c_i |x_i - w_i| \right)$
6. DISKONTINUIERLICH $f^{(6)} = \begin{cases} 0 & \text{für } x_1 > w_1, w_2 \\ \exp \left(\sum_{i=1}^s c_i x_i \right) & \text{sonst} \end{cases}$

Familie 1: Oszillatorisch

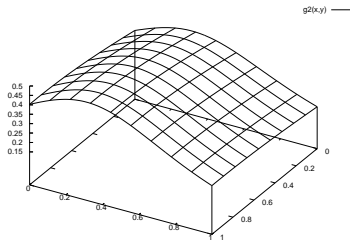


Beispiel

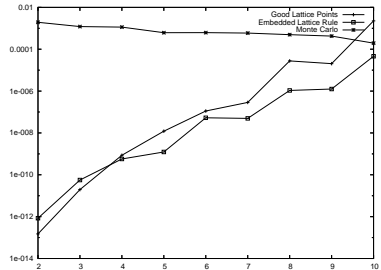


Integrationsfehler

Familie 2: Produkt-Höchstwert

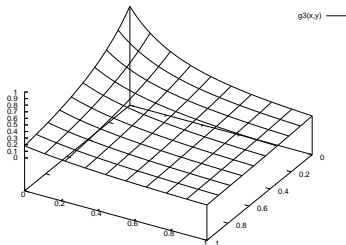


Beispiel

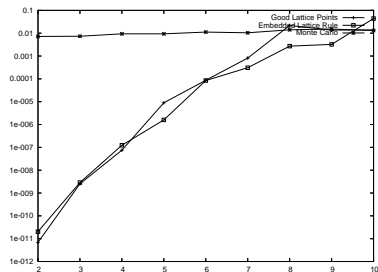


Integrationsfehler

Familie 3: Ecken-Höchstwert

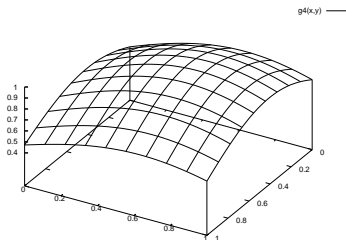


Beispiel

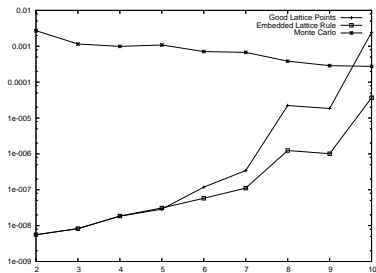


Integrationsfehler

Familie 4: Normalverteilung

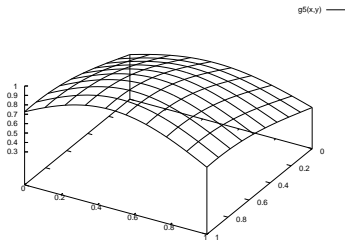


Beispiel

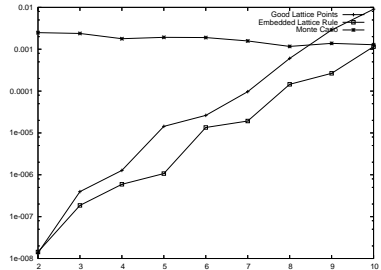


Integrationsfehler

Familie 5: Kontinuierlich

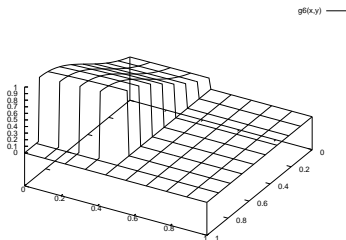


Beispiel

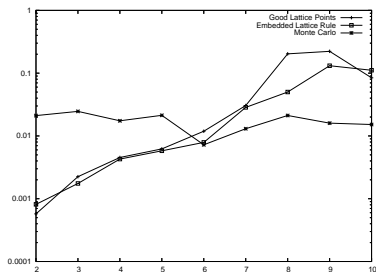


Integrationsfehler

Familie 6: Diskontinuierlich



Beispiel



Integrationsfehler

Zusammenfassung

- Gitterpunkt-Formeln geeignetes Instrument zur numerischen multivariaten Integration
- Periodisierung nicht-periodischer Integranden unabdingbar
- Vorteile der Methode der eingebetteten Gitterpunkt-Formeln gegenüber der Methode der guten Gitterpunkte

Download

Die vollständige Ausarbeitung, dieser Foliensatz sowie die Java-Module können von folgender Seite heruntergeladen werden:

`http://www.stud.fernuni-hagen.de
/q1471341/Studies/index.htm#hs-mathematik`

Programmdemonstration

... und zum Abschluss¹:

Eine kurze Vorführung des Programms

¹ falls die Zeit dafür noch reicht