FU Berlin: WiSe 2019/20 (Mathematik 2, Weber)

Übungszettel Nr. 10, Abgabe 14.01.2020 um 8:00 Uhr

Lernziele: Bereichsintegrale, Monte-Carlo-Quadratur

Aufgabe 1: (Bereichsintegral auf einer Box)

Folgendes bestimmte Bereichsintegral soll gebildet werden:

$$\int_B \mathrm{x}^2 \cos(y)\, d(x,y),$$

wobei über ein rechteckiges Gebiet B mit den Grenzen $-1 \leq x \leq 1$ und $0 \leq y \leq \frac{\pi}{2}$ zu integrieren sei. Berechnen Sie dieses Integral, indem Sie es als Doppelintegral schreiben

$$\int_B \mathrm{x}^2 \cos(y)\, d(x,y) = \int_{-1}^{1} \int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2 \cos(y)\ dy\, dx = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_{-1}^{1} x^2 \cos(y)\ dx\, dy.$$

(Reihenfolge "erst x dann y" oder "erst y dann x" spielt keine Rolle, Satz von Fubini.)

Diese Integrale lösen Sie "von innen nach außen". Wenn Sie z.B. das "innere" Integral $\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2 \cos(y)\ dy = F(x)$ lösen wollen, dann ist in diesem Falle x als eine Konstante anzusehen. Im äußeren Integral $\int_{-1}^{1} F(x)dx$ ist dann y bereits "eliminiert".

Aufgabe 2: (Bereichsintegral auf einem Normalgebiet)

Es soll folgendes Integral gerechnet werden:

$$\int_K 1\, d(x,y,z),$$

wobei das Normalgebiet K durch die Grenzen $0 \leq z \leq 1$, $-z \leq x \leq z$ und durch $-\sqrt{z^2 - x^2} \leq y \leq \sqrt{z^2 - x^2}$ bestimmt ist.

a) Machen Sie sich zunächst klar, dass das Gebiet K ein Kegel darstellt. Wie liegt dieser Kegel im Raum? Welches Volumen hat dieser Kegel (Formelsammlung aus der Schulmathematik verwenden)?

b) Ist ein Gebiet begrenzt durch folgende Grenzen

$$a \leq z \leq b, \qquad g(z) \leq x \leq h(z),\ \ u(x,z) \leq y \leq v(x,z),$$

(evtl. indem man x, y und z entsprechend festlegt... immer eine Variable mehr in den Grenzen), dann lässt sich das Bereichsintegral auch durch Mehrfachintegrale lösen:

$$\int_K \mathrm{f(x,y,z)}\, d(x,y,z) = \int_a^b \int_{g(z)}^{h(z)} \int_{u(x,z)}^{v(x,z)} f(x,y,z)\, dy\, dx\, dz.$$

Stellen Sie das entsprechende Mehrfachintegral für das zu lösende Bereichsintegral auf.

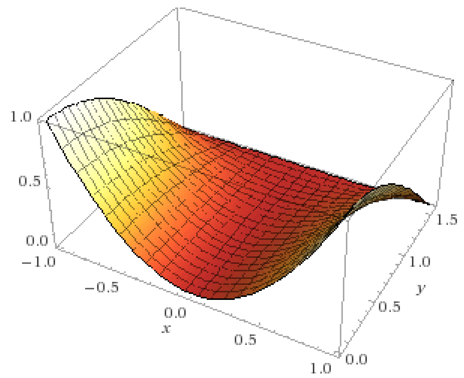
c) Rechnen Sie das Integral aus. Gehen Sie dabei wie in Aufgabe 1 von "innen nach außen" vor. Hinweis: Stammfunktion $\int 2\sqrt{a^2 - x^2}\, dx = x\sqrt{a^2 - x^2} + a^2 \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) + c$

Aufgabe 3: (Monte-Carlo-Quadratur mittels Gleichverteilung)

Die Stammfunktion in Aufgabe 2c) lässt es schon erahnen, dass es bei dem Berechnen von Bereichsintegralen zu komplizierten Funktionsausdrücken kommen kann. Im Rechner werden hochdimensionale Bereichsintegrale dann auch nicht mehr analytisch ausgerechnet, sondern mit Hilfe von nummerischen Approximationen.

Eine Möglichkeit ist die Verwendung von Monte-Carlo-Methoden, die wir nun auf das erste Integral anwenden wollen:

In der ersten Aufgabe nimmt die Funktion $z = f(x,y) = x^2 \cos(y)$ Werte zwischen 0 und 1 an. Eine Box im dreidimensionalen Raum, deren Kanten den Grenzen $-1 \leq x \leq 1$ und $0 \leq y \leq \frac{\pi}{2}$ und $0 \leq z \leq 1$ gehorchen, schließt daher vollständig den Funktionsgraphen von $f(x,y)$ auf dem Bereich B ein. So wie in diesem Bild:



Das Volumen der Box ist bekannt: π. Aber welcher *Anteil* von diesem Volumen liegt *unterhalb* der Kurve (das Volumen *unter* der Kurve ist ja gerade das Integral)? Die Lösung: Man zieht zufällig gleichverteilt 3D-Punkte aus dieser Box (alle Koordinaten gleichverteilt zwischen ihren Grenzen ziehen). Dann berechnet man den Anteil der zufällig gezogenen Punkte, die unterhalb des Funktionsgraphen liegen (also der Bedingung $z \leq f(x,y)$ genügen). Sei dieser Anteil mit A bezeichnet, dann ist das Integral $A\pi$. Führen Sie ein solches Zufallsexperiment durch! Sie benötigen dazu einen Rechner, der Ihnen gleichverteilte Zufallszahlen liefert, die Sie entsprechend auf die Kanten der Box umrechnen müssen.

Aufgabe 4: (Monte-Carlo-Quadratur mittels Dichteschätzung)

Es gibt unzählig viele Varianten der Monte-Carlo-Quadratur. Das Verfahren aus Aufgabe 3 ließe sich z.B. auch auf beliebige Dimensionen erweitern. Das prinzipielle Problem mit dem Verfahren ist folgendes: Das Verhältnis *A* kann sehr klein sein, so dass selten ein Punkt gezogen wird, der unterhalb der Kurve liegt. Je höher die Dimension, desto häufiger wird dieses Problem auftreten. Eine Möglichkeit ist es, nicht gleichverteilt Punkte zu ziehen, sondern die Monte-Carlo-Punkte an Stellen zu konzentrieren, an denen die Funktionswerte (betragsmäßig) groß sind.

Wieder vergleicht man das Resultat des Samplings (= Ziehen von Stichproben) von z.B. 1000 Punkten gemäß Funktionswert mit einem gleichverteilten Sampling von 1000 Punkten aus einer Box. Dieses Mal gilt folgendes: Die 1000 gleichverteilten Punkte hätten eine bestimmte Dichte im Raum, die man sich theoretisch überlegen kann (so und so viel Punkte pro Volumeneinheit). Je dichter die 1000 nicht-gleichverteilten Punkte liegen, desto kleiner das Volumen unter der Kurve.

Dieses Verfahren wird in einem Artikel von Herrn Andrae und mir beschrieben. Er ist sicherlich nicht einfach zu lesen. Bereichsintegrale werden hier mit $\int_\Omega f(x)\,dx$ bezeichnet, wobei das x jedoch mehrdimensional gedacht ist.

a) Schauen Sie sich Formel (6) in diesem Artikel an. Erinnern Sie sich an die Eigenschaften des Absolutbetrags und versuchen Sie, die Formel nachzuvollziehen.

b) Versuchen Sie Kapitel 2 zu verstehen. Der Schlüssel zum Verständnis liegt in dem Wissen, was eine Dirac-Delta-Funktion ist und wie sich der Erwartungswert einer Funktion $g(x)$ bei gegebener Verteilung der x-Werte berechnen lässt.

Angewendet wurde die Methode in:

M. Weber, A. Bujotzek, K. Andrae, M. Weinhart, R. Haag: *Computational entropy estimation of linear polyether modified surfaces and correlation with protein resistant properties of such surfaces. Molecular Simulation, 37(11):899-906, 2011.*

Viel Erfolg!