Britta Nestler
Fakultät IWI, Hochschule Karlsruhe und Fakultät Maschinenbau, KIT

Klausur zur Modellierung und Simulation
31. Januar 2017, WS 2016/17

Es sind keine Hilfsmittel zugelassen. Bearbeitungszeit: 60 Minuten (Master Hochschule, Aufgaben 1 - 4) bzw. 90 Minuten (KIT, alle Aufgaben)

Aufgabe 1: System gewöhnlicher Differenzialgleichungen

Gegeben ist das Differenzialgleichungssystem

$$\begin{aligned} y_1'(x) &= -x\, y_1(x) \\ y_2'(x) &= -y_1(x) - y_2(x) \end{aligned}$$

mit der Anfangsbedingung $y_1(0) = 2$ und $y_2(0) = 0$.

a) Geben Sie die Euler'sche Iterationsformel für das Differenzialgleichungssystem an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ die ersten beiden Iterationsschritte.

b) Geben Sie das Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung für das Differenzialgleichungssystem an.

c) Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta Verfahrens 2. Ordnung.

Aufgabe 2: (Interpolationspolynome, Taylorreihe und Differenzenformeln)

a) Gegeben sind folgende Messdaten eines Prozessablaufs:

x_k	-1	0	$\frac{1}{2}$	1
y_k	-1	1	8	27

Bestimmen Sie mit Hilfe des Newton-Algorithmus das Interpolationspolynom $p(x)$, das die Messdaten verbindet.

b) Gegeben ist die Funktion $f(x) = (1+2x)^3$. Entwickeln Sie die Funktion $f(x)$ an der Stelle $x_0 = 0$ in eine Taylorreihe.

c) Vergleichen Sie das Ergebnis des Interpolationspolynoms $p(x)$ aus Aufg. 2 a) mit der Taylorreihe aus Aufg. 2 b) (Hilfe: Ausmultiplizieren).

d) Bestimmen Sie die rechtsseitige Ableitung $D^+f(x)$ der Funktion $f(x)$ an der Stelle $x_0 = 0$ für zwei Schrittweiten $h = 1$ und $h = 0.5$.

e) Berechnen Sie den Wert der 1. Ableitung $f'(x)$ an der Stelle $x_0 = 0$ und geben Sie für die beiden Schrittweiten h aus Aufg. 2 d) den jeweiligen Fehler $e(h) = |D^+f(x_0) - f'(x_0)|$ an.

Aufgabe 3: Partielle Differenzialgleichung und Taylorformel

Gegeben ist das Raum-Zeit-Problem $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial x}\Big(1 - x\Big)$ für $1 \leq x \leq 5$ und $t \geq 0$ mit Randbedingungen $u(t, 1) = 0$, $u(t, 5) = 4$ und Anfangsbedingung $u(0, x) = 1$.

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und zentralen Differenzen in den Ortsableitungen x. Wählen Sie für das diskrete Raum-Zeit Gitter eine Zerlegung von $\Delta x = 1$ und $\Delta t = 1/2$. Formulieren Sie das explizite finite Differenzenverfahren und geben Sie die Randbedingungen und die Anfangsbedingung in diskreter Form an.

b) Skizzieren Sie für die gegebene Raum-Zeit-Ebene das diskrete Raum-Zeit-Gitter und markieren Sie mit unterschiedlichen Symbolen die Positionen u_i^n der Anfangs- und Randbedingungen.

b) Berechnen Sie unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte u_1^1, u_2^1, u_3^1 der ersten Zeititeration.

Aufgabe 4: Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben sind die folgenden Messpunkte:

x_i	-2	-1	0	1	2
y_i	1/2	1/2	2	3/2	5/2

Gesucht ist eine Ausgleichsfunktion der Form: $f(x) = a + bx$. Zur Bestimmung der Funktion $f(x)$ gehen Sie nach den folgenden Schritten vor:

a) Formulieren Sie das Fehlergleichungssystem $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.

b) Stellen Sie das Normalengleichungssystem $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$ auf.

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsparabel $f(x) = a + bx$.

d) Tragen Sie die (x_i, y_i) Wertepaare in ein Koordinatensystem ein und skizzieren Sie die in c) gefundene Lösung.

Aufgabe 5: Nullstellenberechnung und numerische Integration
Gegeben sind die beiden Funktionen $f(x) = x^3$ und $g(x) = 2x + 1$.

a) Gesucht ist der Schnittpunkt der beiden Funktionen. Formulieren Sie hierzu ein geeignetes Nullstellenproblem $h(x) = 0$.

b) Skizzieren Sie für die Startwerte $x_1 = 0$ und $x_2 = 2$ den Bisektionsalgorithmus mit (i) Initialisierung, (ii) Iteration und (iii) Abbruch.

c) Berechnen Sie für $h(x) = 0$ zu den Startwerten $x_1 = 0$ und $x_2 = 2$ den ersten Näherungswert x_3 des Sekantenverfahrens (regula falsi).

d) Stellen Sie nun die Newtonformel auf und berechnen Sie für den Startwert $x_0 = 1$ den ersten Iterationsschritt.

e) Berechnen Sie den Näherungswert des Integrals $\int_0^4 h(x)dx = \int_0^4 x^3 - 2x - 1dx$ mit der Simpsonformel für eine Schrittweite von $h = 1$.

f) Implementieren Sie die Simpsonformel für `n` Stützstellen im Intervall $[a, b]$ unter Verwendung der C-Syntax und wenden Sie die Funktion auf $h(x)$ aus Aufg. 5 e) an:

```
double h(...) { ... }
double int_simpson(double (*h)(double), double a, double b, int n) {
  ...
}
```

Aufgabe 6: Kubische Splines

Gegeben sind die Stützpunkte $(0, 2)$, $(1, 0)$, und $(2, 3)$.

a) Skizzieren Sie in einem $x - g(x)$ Diagramm das Vorgehen zur Bestimmung der Spline-Funktion $g(x)$ in den Teilintervallen $[0, 1]$ und $[1, 2]$.

b) Bestimmen Sie zu den natürlichen Randbedingungen $g_1''(0) = 0$ und $g_2''(0) = 0$ für die gegebenen Stützpunkte die kubische Spline-Funktion

$$g(x) = \begin{cases} g_1(x) = a_{13}x^3 + a_{12}x^2 + a_{11}x + a_{10} & \text{für} \quad 0 \leq x \leq 1 \\ g_2(x) = a_{23}x^3 + a_{22}x^2 + a_{21}x + a_{20} & \text{für} \quad 1 \leq x \leq 2 \end{cases}$$

c) Prüfen Sie, ob die Funktion $g(x)$ durch den Punkt $(1, 0)$ verläuft.

d) Zur Bestimmung der Koeffizienten a_{ij} des Splines muss das Gleichungssystem $Ma = y$ gelöst werden. Für N Punkte sind der Vektor `double a[N]` und die Inverse der Matrix M `double Minv[N][N]` bereits implementiert. Bestimmen Sie `double a[N]` mit einer Matrix-Vektor-Multiplikation. Achten Sie darauf, dass C Variablen nicht zwangsweise mit 0 initialisiert sind.

Viel Erfolg!

Britta Nestler
Fakultät IWI, Hochschule Karlsruhe und Fakultät Maschinenbau, KIT

Formelsammlung zur Vorlesung „Modellierung und Simulation"

Taylorformel

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \ldots + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n + R_n(x)$$

Newton-Algorithmus

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Regula-Falsi Verfahren

$$x_{n+1} = x_{n-1} - f(x_{n-1}) \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$$

Rechteckformel

$$I = h \sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i), \quad \text{mit} \quad \xi_i = x_i \quad \text{oder} \quad \xi_i = \frac{1}{2}\Big(x_i + x_{i+1}\Big) \quad \text{oder} \quad \xi_i = x_{i+1}$$

Trapezformel

$$I_T = \frac{h}{2}\Big(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \ldots + 2f_{n-1} + f_n\Big)$$

Simpsonformel

$$I_S = \frac{4}{3} h(f_1 + f_3 + \ldots + f_{2m-1}) + \frac{2}{3} h(f_2 + f_4 + \ldots + f_{2m-2}) + \frac{1}{3} h(f_0 + f_{2m})$$

Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\Big\{f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_k + hf(x_k, y_k))\Big\}$$

Runge-Kutta Verfahren 4. Ordnung

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{6}\Big(F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4\Big)$$

mit

$$\begin{aligned}
F_1 &= f(x_k, y_k)\\
F_2 &= f(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}F_1)\\
F_3 &= f(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}F_2)\\
F_4 &= f(x_{k+1}, y_k + hF_3)
\end{aligned}$$

Fehlerfunktional des Ausgleichsproblems

$$E(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m) := \sum_{i=1}^{n}\Big(y_i - f(x_i)\Big)^2 = \sum_{i=1}^{n}\Big(y_i - \sum_{j=1}^{m}\lambda_j f_j(x_i)\Big)^2$$

Jacobi-Matrix

$$\boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}_0) = \begin{pmatrix}
\frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}_0) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}_0) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}_0)\\
\frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}_0) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}_0) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}_0)\\
\vdots & \vdots & & \vdots\\
\frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}_0) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}_0) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}_0)
\end{pmatrix}$$

Gauß-Newton-Verfahren (für nichtlineare Ausgleichsprobleme):

Für $k = 0, 1, \ldots$

- Berechne $\boldsymbol{\delta}^{(k)}$ als Lösung des linearen Ausgleichsproblems: Minimiere $||\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \boldsymbol{Df}(\boldsymbol{x}^{(k)})\boldsymbol{\delta}^{(k)}||_2^2$
- Setze $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}^{(k)}$.