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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation WS 2013/2014

Aufgabe 1: Polynominterpolation und Taylor-Reihe

a) Gegeben sind die Messpunkte $(-2, 12)$, $(-1, 6)$, $(0, 2)$, $(1, 0)$ und $(2, 24)$. Bestimmen Sie durch Anwendung des Newton-Algorithmus (dividierte Differenzen) das Interpolationspolynom $p(x)$, das die Messpunkte verbindet.
Ergebnis:
$a_0 = 12$
$a_1 = -6$
$a_2 = 1$
$a_3 = 0$
$p(x) = 12 - 6(x + 2) + (x + 2)(x + 1)$

b) Bringen Sie den Funktionsausdruck für $p(x)$ durch Ausmultiplizieren der Linearfaktoren in die Form $p(x) = b_3x^3 + b_2x^2 + b_1x - b_0$ und berechnen Sie mit dem Horner-Schema den Funktionswert $p(x_0)$ an der Stelle $x_0 = 4$.
Ergebnis:
$p(x) = x^2 - 3x + 2$
$p(4) = 6$

c) Gegeben ist die Funktion $f(x) = e^x \cdot sin(x)$. Berechnen Sie die ersten vier Ableitungen der Funktion $f(x)$.
Ergebnis:
$g'(x) = e^x \cdot sin(x) + e^x \cdot cos(x)$
$g''(x) = 2e^x \cdot cos(x)$
$g'''(x) = 2e^x \cdot cos(x) - 2e^x \cdot sin(x)$
$g''''(x) = -4e^x \cdot sin(x)$

d) Berechnen Sie das Tayor-Polynom um den Entwicklungspunkt $x_0 = 0$ bis einschließlich zum vierten Glied.
Ergebnis:
$f(x) = x + x^2 + \frac{1}{3}x^3$

Aufgabe 2: Splines und Nullstellen

a) Gegeben sind die Stützpunkte $(-2, 0)$, $(-1, 3)$ und $(0, 4)$ und die Zusatzbedingung $g_1'(0) = 1$. Bestimmen Sie die quadratische Spline-Funktion

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

indem Sie die entsprechenden Bedingungen und das Gleichungssystem formulieren und lösen.

Ergebnis:
$g(-2) = 0$
$g_1(-1) = 3$
$g_2(-1) = 3$
$g_2(0) = 4$
$-2a_{12} + a_{11} = -2a_{22} + a_{21}$
$a_{11} = 1$
$a_{10} = \frac{14}{3}$
$g_1(x) = -\frac{2}{3}x^2 + x + \frac{14}{3}$
$a_{20} = 4$
$a_{22} = -\frac{4}{3}$
$g_2(x) = -\frac{4}{3}x^2 - \frac{1}{3}x + 4$

Aufgabe 3: Numerisches Differenzieren und Integrieren
Gegeben ist die Funktion

$$f(x) = \frac{2x}{x+1}.$$

a) Bestimmen Sie für eine Schrittweite von $h = 1/2$ den Wert der rechtsseitigen Ableitung $D^+f(x_0)$ an der Stelle $x_0 = 1$.
Ergebnis:
$D^+f(x_0) = \frac{1}{5}$

b) Gesucht ist ein Näherungswert des Integrals über die Funktion $f(x)$ im Intervall $I = [1, 3]$, d.h. für $\int_1^3 f(x)dx$. Teilen Sie das Intervall I in zwei gleiche Teilintervalle I_1 und I_2. Berechnen Sie den numerischen Wert des Integrals mit der Trapezformel und mit der Simpson-Formel.
Ergebnis:
$f_0 = f(1) = 1$
$f_1 = f(2) = \frac{4}{3}$
$f_2 = f(3) = \frac{3}{2}$
$I_T = \frac{31}{12}$
$I_S = \frac{47}{18}$

Aufgabe 4: Lineares Ausgleichsproblem
Gegeben sind die Messdaten $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, 5$ mit:

x_i	-2	-1	0	1	2
y_i	2	3	3	4	3

Berechnen Sie zu den Messdaten die Ausgleichsgerade $f(x) = a + bx$, sodass die $\sum_{i=1}^5 (y_i - f(x_i)))^2$ minimal wird. Gehen Sie hierzu wie folgt vor:

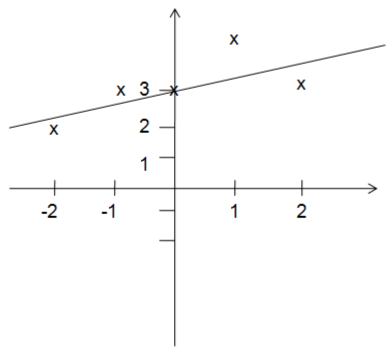
a) Formulieren Sie das Fehlergleichungssystem $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.
Ergebnis:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 3 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}$$

b) Stellen Sie das Normalengleichungssystem $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$ auf.
Ergebnis:
$\begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} 15 \\ 3 \end{pmatrix}$

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsfunktion $f(x) = a + bx$.
Ergebnis:
$f(x) = 3 + \frac{3}{10}x$

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



Aufgabe 5: Anfangswertproblem

Gegeben ist das System aus gewöhnlichen Differenzialgleichungen

$$y_1'(x) = \frac{1}{2}y_2(x) - y_1(x)y_2(x) \tag{1}$$
$$y_2'(x) = -\frac{1}{2}y_1^2(x) + 5x \tag{2}$$

mit den Anfangswerten $y_1(1/2) = 1, y_2(1/2) = 2$.

a) Geben Sie für das System aus Differenzialgleichungen die Eulersche Iterationsformel an.
Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + h(\frac{1}{2}y_{2,k} - y_{1,k}y_{2,k})$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + h(-\frac{1}{2}y_{1,k}^2 + 4x_k)$
$y_{1,0} = 0$
$y_{2,0} = 2$

b) Bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Euler-Verfahrens.
Ergebnis:
$y_{1,1} = 1$
$y_{2,1} = 3$

c) Geben Sie nun das Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung für das System aus zwei Gleichungen an.
Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + \frac{h}{2}\Big\{(\frac{1}{2}y_{2,k} - y_{1,k}y_{2,k}) + \frac{1}{2}(y_{2,k} + h[-\frac{1}{2}y_{1,k}^2 + 4x_k])$
$-(y_{1,k} + h[y_{2,k} - y_{1,k}y_{2,k}]) \cdot (y_{2,k} + h[-\frac{1}{2}y_{1,k}^2 + 4x_k])\Big\}$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + \frac{h}{2}\Big\{\Big(-\frac{1}{2}y_{1,k}^2 + 4x_k) + (-\frac{1}{2})(y_1 + h[\frac{1}{2}y_{2,k} - y_{1,k}y_{2,k}]\Big)^2 + 4x_{k+1}\Big\}$
$y_{1,0} = 1$
$y_{2,0} = 2$

d) Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt.
Ergebnis:
$y_{1,1} = \frac{1}{4}$
$y_{2,1} = \frac{111}{32}$

Aufgabe 6: Partielle Differenzialgleichung und Taylor-Formel

Gegeben ist die partielle Differenzialgleichung

$$u_t(t,x) = u_{xx}(t,x) - \alpha\, u(t,x) \cdot u_x(t,x) \quad \text{für} \quad x \in [1,3] \quad \text{und} \quad t \geq 0$$

mit den Randbedingungen $u(t,1) = -1$, $u(t,3) = 4$ und der Anfangsbedingung $u(0,x) = 1$, $1 < x < 3$. Das Gitter ist so gewählt, dass $\Delta x = 1/2$ und $\Delta t = 1/4$ ist.

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und zentralen Differenzen in der Ortskoordinate x. Stellen Sie für $u(t,x)$ die Formel für das explizite Differenzenverfahren in diskreter Form $u_i^n, i = 0,\dots,4, n = 0,\dots$ auf. Geben Sie hierbei auch die Randbedingungen und die Anfangsbedingung in diskreter Form an.
Ergebnis:
$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t\Big\{\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} - \alpha u_i^n \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}\Big\}$
$u_0^n = -1; \quad u_4^n = 4; \quad u_i^0 = 1$

b) Setzen Sie $\alpha = 2$ und berechnen Sie unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte u_1^1, u_2^1 und u_3^1 als Ergebnis der ersten Zeititeration.
Ergebnis:
$u_1^1 = -2; \quad u_2^1 = 1; \quad u_1^3 = \frac{5}{2}$

c) Betrachten Sie nun $\alpha = 0$ und das explizite Lösungsverfahren

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{(\Delta x)^2}\Big(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n\Big).$$

Entwickeln Sie die Anteile $u(t+\Delta t, x)$ als Funktion von t, bei festem x, und $u(t, x+\Delta x)$, $u(t, x-\Delta x)$ als Funktion von x bei festem t, jeweils in Taylor-Reihen bis einschließlich vierten Ordnung.
Ergebnis:

$u(t+\Delta t,x) = u(t,x) + u_t(t,x)\Delta t + \frac{u_{tt}(t,x)}{2!}\Delta t^2 + \frac{u_{ttt}}{3!}\Delta t^3 + \frac{u_{4t}}{4!}\Delta t^4 + ...$
$u(t,x+\Delta x) = u(t,x) + u_x(t,x)\Delta x + \frac{u_{xx}(t,x)}{2!}\Delta x^2 + \frac{u_{xxx}(t,x)}{3!}\Delta x^3 + \frac{u_{4t}}{4!}\Delta x^4 + ...$
$u(t,x-\Delta x) = u(t,x) - u_x(t,x)\Delta x + \frac{u_{xx}}{2!}\Delta x^2 + \frac{u_{xxx}}{3!}\Delta x^3 + \frac{u_{4x}}{4!}\Delta x^4 + ...$

d) Bestimmen Sie durch Einsetzen der Taylor-Reihen den Diskretisierungsfehler für das Differenzenverfahren

$$e = \frac{u(t+\Delta t,x) - u(t,x)}{\Delta t} - \frac{u(t,x+\Delta x) - 2u(t,x) + u(t,x-\Delta x)}{\Delta x^2}$$

in der Zeit- und Ortsvariablen.
Ergebnis:
$e = u_t(t,x) + O(\Delta t) - (u_{xx}(t,x) + O(\Delta x^2))$

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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation SS 2014

Aufgabe 1: Anfangswertproblem

Gegeben ist das dynamische System (Anfangswertproblem)

$$y'(t) = y(t)\Big(2 - 0.1 \cdot y(t)\Big) \quad \text{mit} \quad y(0) = 10.$$

a) Geben Sie für das Anfangswertproblem die Eulersche Iterationsformel an.
Ergebnis:
$y_{k+1} = y_k + h\Big\{y_k(2 - 0,1 \cdot y_k)\Big\}$
$y_0 = 10$
$x_k = k \cdot h$

b) Bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 0.1$ den ersten Iterationsschritt des Euler-Verfahrens.
Ergebnis:
$h = 0,1$
$y_1 = 11$

c) Geben Sie nun das Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung an.
Ergebnis:
$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\Big\{y_k(2 - 0,1y_k) + \Big[y_k + h\{y_k(2 - 0,1y_k)\}\Big] \cdot$
$\Big(2 - 0,1[y_k + h\{y_k(2 - 0,1y_k)\}]\Big)\Big\}$

d) Bestimmen Sie für $h = 0.1$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta-Verfahrens zweiter Ordnung.
Ergebnis:
$y_1 = \frac{21,99}{2}$

Aufgabe 2: Nullstellenberechnung und numerische Integration

a) Gegeben ist die Funktion $h(x) = -x^3 + 4x + 2$. Verwenden Sie das Newton-Verfahren zur Bestimmung einer Nullstelle $h(x) = 0$. Wählen Sie den Startwert $x_0 = 2$ und berechnen Sie den ersten Newton-Iterationsschritt.
Ergebnis:
$x_1 = \frac{9}{4}$

b) Verwenden Sie nun das Sekantenverfahren (Regula falsi) und berechnen Sie den ersten Iterationschritt zu den Startwerten $x_0 = 1$ und $x_1 = 2$.
Ergebnis:

$x_2 = \frac{8}{3}$

c) Gegeben ist die Funktion $k(x) = \frac{2x}{x+1}$. Gesucht ist ein Näherungswert des Integrals $\int_1^3 k(x)dx$ im Intervall $I = [1,3]$. Teilen Sie das Intervall I in zwei gleiche Teilintervalle I_1 und I_2. Berechnen Sie den numerischen Wert des Integrals mit der Trapezformel.
Ergebnis:
$k(1) = 1$
$k(2) = \frac{4}{3}$
$k(3) = \frac{3}{2}$
$I_T = \frac{31}{12}$

d) Berechnen Sie nun das Integral mit der Simpson-Formel mit derselben Intervallzerlegung wie in c).
Ergebnis:
$I_S = \frac{47}{18}$

Aufgabe 3: Lineares Ausgleichsproblem
Gegeben sind die Messdaten $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, 3$ mit:

x_i	0	1	2
y_i	-3	-5	2

Berechnen Sie zu den Messdaten eine Ausgleichsparabel $f(x) = a + bx + cx^2$ mit den Ansatzfunktionen $f_1(x) = 1, f_2(x) = x$ und $f_3(x) = x^2$, sodass die $\sum_{i=1}^3 (y_i - f(x_i)))^2$ minimal wird. Gehen Sie hierzu wie folgt vor:

a) Formulieren Sie das Fehlergleichungssystem $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.
Ergebnis:
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} -3 \\ -5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

b) Stellen Sie das Normalengleichungssystem $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$ auf.
Ergebnis:
$$A^TA = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 5 \\ 3 & 5 & 9 \\ 5 & 9 & 17 \end{pmatrix} \quad A^Ty = \begin{pmatrix} -6 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsfunktion $f(x) = a + bx + cx^2$.
Ergebnis:
$a = -3$
$b = -\frac{13}{2}$
$c = \frac{9}{2}$

Aufgabe 4: Numerisches Differenzieren

a) Bestimmen Sie für eine allgemeine Funktion $f(x)$ mit Hilfe der Taylor-Formel den Diskretisierungsfehler der zentralen Differenzenformel der 2. Ableitung

$$D^2 f(x_0) = \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2}.$$

(Hinweis: Entwickeln Sie $f(x_0+h)$ und $f(x_0-h)$ in eine Taylor-Reihe)
Ergebnis:
$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + f''\frac{(x_0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + ...$
$f(x_0-h) = f(x_0) - f'(x_0)h + f''\frac{(x_0)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x_0)}{3!}h^3 + ...$
$\frac{1}{h^2}\Big\{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)\Big\} = f''(x_0) + Q(h^2)$

b) Bestimmen Sie für die Funktion $f(x) = x + \frac{2}{x-2}$ den Näherungswert der zweiten Ableitung über die zentrale Differenzenformel $D^2 f(x)$ an der Stelle $x_0 = 1$ und für eine Schrittweite von $h = 1/2$.
Ergebnis:
$D^2 f(x) = -\frac{16}{3}$

c) Leiten Sie über den Ansatz $D^{3-} f(x_0) = D^-(D^2 f(x_0))$ aus der zentralen Differenzenformel für die zweite Ableitung $D^2 f(x_0)$ eine linksseitige Differenzenformel für die dritte Ableitung her.
Ergebnis:
$D^-(D^2 f(x_0)) = \frac{1}{h^3}\Big\{f(x_0+h) - 3f(x_0) + 3f(x_0-h) - f(x_0-2h)\Big\}$

d) Bestimmen Sie für die Funktion $f(x)$ unter b) den Wert der linksseitigen dritten Ableitung $D^{3-} f(x_0)$ an der Stelle $x_0 = 1$ und für eine Schrittweite von $h = 1/2$.
Ergebnis:
$D^{3-} f(x_0) = 24$

Aufgabe 5: Interpolationspolynom und kubische Spline-Funktion

a) Gegeben sind die Stützpunkte $(-2, 4)$, $(-1, 1)$, $(0, 0)$ und $(4, 6)$. Bestimmen Sie über das Verfahren der dividierten Differenzen das Interpolationspolynom.
Ergebnis:
$a_1 = -3$
$a_2 = 1$
$a_3 = -\frac{1}{12}$
$p(x) = 4 - 3(x+2) + (x+2)(x+1) - \frac{1}{12}(x+2)(x+1)x$

b) Gegeben sind die Stützpunkte $(-2, 4)$, $(-1, 1)$ und $(0, 0)$. Stellen Sie zur Bestimmung der kubischen Spline-Funktionen

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

die erforderlichen 8 Bedingungen aus Stetigkeit, Differenzierbarkeit und den Randbedingungen $g_2'(0) = 0, g_2''(0) = 0$ auf.
Ergebnis:

$$\begin{cases} g_1(-2) = 4 & -8a_{13} + 4a_{12} - 2a_{11} + a_{10} = 4 \\ g_1(-1) = 1 & -a_{13} + a_{12} - a_{11} + a_{10} = 1 \\ g_2(-1) = 1 & -a_{23} + a_{22} - a_{21} + a_{20} = 1 \\ g_2(0) = 0 & a_{20} = 0 \end{cases}$$

$g_1'(-1) = g_2'(-1) \quad 3a_{13} - 2a_{12} + a_{11} = 3a_{23} - 2a_{22} + a_{21}$
$g_1''(-1) = g_2''(-1) \quad -6a_{13} + 2a_{12} = -6a_{23} + 2a_{22}$
$g_2'(0) = 0 \quad a_{21} = 0$
$g_2''(0) = 0 \quad a_{22} = 0$

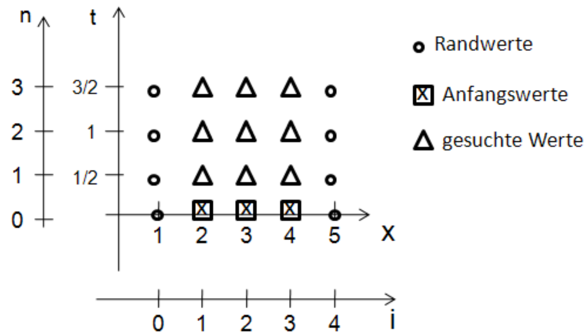
c) Lösen Sie das aufgestellte Gleichungssystem für die Koeffizienten a_{ij} auf und bestimmen Sie die kubischen Spline-Funktionen $g_1(x)$ und $g_2(x)$.
Ergebnis:
$a_{23} = -1$
$a_{12} = 12$
$a_{11} = 12$
$a_{10} = 4$
$g_1(x) = 3x^3 + 12x^2 + 12x + 4$

Aufgabe 6: Partielle Differenzialgleichung

Gegeben ist das Raum-Zeit-Problem $u_t = u_{xx} - u_x + 2x$ für $1 \leq x \leq 5$ und $t \geq 0$ mit den Randbedingungen $u(t, 1) = 3$, $u(t, 5) = 1$ und der Anfangsbedingung $u(0, x) = 2$. Wählen Sie für das diskrete Raum-Zeit-Gitter eine Zerlegung von $\Delta x = 1$ und $\Delta t = 1/2$.

a) Skizzieren Sie das diskrete Raum-Zeit-Gitter für die angegebenen Intervalle und Diskretisierungen in Raum- und Zeitrichtung. Markieren Sie hierbei die gegebenen Rand- und Anfangsbedingungen sowie die gesuchten Werte u_1^n, u_2^n, u_3^n.
Ergebnis:
Rand: mit $u(t, 1) = 3$
Anfang: und $u(0, x) = 2$
$\Delta x = 1, \Delta t = \frac{1}{2}$
$u(t, 5) = 1$

b) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen für u_t und mit zentralen Differenzen für u_x, u_{xx}. Formulieren Sie das explizite finite Differenzenverfahren und geben Sie hierbei auch die Rand- und Anfangsbedingungen in diskreter Form an.
Ergebnis:
$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \left\{ \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} - \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} + 2x_i \right\}$
mit Randbed. $u_0^n = 3, u_4^n = 1, n = 0, 1, 2, ...$



und Anfangsbed. $u_i^0 = 2, i = 1, 2, 3$

c) Berechnen Sie unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte u_1^1, u_2^1, u_3^1 der ersten Zeititeration.
Ergebnis:
$u_1^1 = \frac{19}{4}$
$u_2^1 = 5$
$u_3^1 = \frac{23}{4}$

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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation 03. Februar 2015, WS 14/15

Aufgabe 1: Nullstellenberechnung
Gegeben sind die beiden Funktionen $g(x) = x^3$ und $h(x) = -3x + 10$.

a) Gesucht ist der Schnittpunkt der beiden Funktionen. Formulieren Sie hierzu ein geeignetes Nullstellenproblem.
Ergebnis:
$x^3 + 3x - 10 = 0$

b) Verwenden Sie das Sekantenverfahren (Regula falsi) und berechnen Sie den ersten Iterationschritt zu den Startwerten $x_0 = 1$ und $x_1 = 2$.
Ergebnis:
$x_0 = -6; x_1 = 4; x_2 = \frac{8}{5}$

c) Verwenden Sie das Newton-Verfahren zur Bestimmung einer Nullstelle. Wählen Sie den Startwert $x_0 = 2$ und berechnen Sie den ersten Newton-Iterationsschritt.
Ergebnis:
$x_1 = \frac{26}{15}$

ogrammieraufgabe: d) Vervollständigen Sie die Implementierung des Newton-Verfahren zur Nullstellensuche:

```
double newton(double (*f)(double), double (*df)(double), double x0)
    ...
}
```

Die Funktion newton erwartet die Funktion f und deren Ableitung df sowie einen Startwert x. Ihr Rückgabewert ist die gefundene Nullstelle mit einer Genauigkeit von 1e−12. Bemerkung: y=f(x) gibt den Funktionswert an der Stelle x zurück. Beenden Sie die Funktion mit dem Wert NaN, falls keine Konvergenz vorliegt (etwa nach 100 Iterationsschritten).

Ergebnis:
$double\ newton(double(*j)double), double(*df)(double), double\ x0)$
$int\ i;$
$double\ kriterium = 1.0(e - 12);$
$double\ m;$
$double\ x\_n = x0;$
$do\{m = x\_n;$
$x\_n = x\_n - (f(x\_n)/df(x\_n));$
$i = 1 + 1;$
$\}while(fabs(m - x\_n) >= kriterium\ \&\&\ i < 100);$

$if(i == 100)\{$
$return\ Nan;\}$
$else\{return\ x\_n\}$
$\}$

Aufgabe 2: Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben sind die Messdaten $(0,1), (1,3), (2,4), (3,4)$. Berechnen Sie zu den Messdaten eine Ausgleichsgerade $f(x) = a + bx$ mit den Ansatzfunktionen $f_1(x) = 1$ und $f_2(x) = x$, sodass die $\sum_{i=1}^{3}(y_i - f(x_i)))^2$ minimal wird. Gehen Sie hierzu wie folgt vor:

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

Ergebnis:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \cdot \lambda = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$

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

Ergebnis:

$$\begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix} \cdot \lambda = \begin{pmatrix} 12 \\ 13 \end{pmatrix}$$

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

Ergebnis:

$a = 1,5; b = 1; f(x) = 1,5 + x$

Aufgabe 3: Polynominterpolation und Spline-Funktion

Gegeben sind die Stützpunkte $(0,2)$, $(1,5)$, und $(2,15)$.

a) Wenden Sie den Newton-Algorithmus (Schema der „dividierten Differenzen") an und bestimmen Sie das Interpolationspolynom, das die Stützpunkte verbindet.

Ergebnis:

$a_0 = 2; a_1 = 3; a_2 = \frac{7}{2}$

$p(x) = a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)(x - x_2) = 2 + 3(x) + \frac{7}{2}(x)(x - 1)$

b) Bestimmen Sie außerdem mit der Zusatzbedingung $g_1'(0) = 2$ eine quadratische Spline-Funktion für die gegebenen Stützpunkte

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

Ergebnis:

$$g(x) = \begin{cases} g_1(x) = x^2 + 2x + 2 & \text{für} \quad 0 \le x \le 1 \\ g_2(x) = 6x^2 - 8x + 7 & \text{für} \quad 1 \le x \le 2 \end{cases}$$

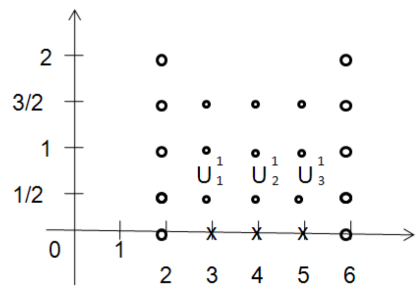
P: c) Zur Bestimmung der Koeffizienten a_{ij} des Splines muss das Gleichungssystem $Ma = y$ gelöst werden. Für N Punkte sind der Vektor double p[N] und die Inverse der Matrix M double Minv[N][N] bereits implementiert. Bestimmen Sie double a[N] mit einer Matrix-Vektor-Multiplikation. Achten Sie darauf,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

$double\ a[N];$
$int\ j;$
$int\ i;$
$for\ (i = 0; i < N; i++)\{$
$a[i] = 0; \}$
$for\ (i = 0; i < N; i++)\{$
$for(j = 0; j < N; j++)$
$\{a[i] += Minv[i][j] * y[j];$
$\}\}$

Aufgabe 4: Partielle Differenzialgleichung

Gegeben ist das Raum-Zeit-Problem $u_t = u_{xx} - 2u_x - x^2$ für $2 \leq x \leq 6$ und $t \geq 0$ mit den Randbedingungen $u(t,2) = 5$, $u(t,6) = 3$ und der Anfangsbedingung $u(0,x) = 1$. Wählen Sie für das diskrete Raum-Zeit-Gitter eine Zerlegung von $\Delta x = 1$ und $\Delta t = 1/2$.

a) Skizzieren Sie das diskrete Raum-Zeit-Gitter für die angegebenen Intervalle und Diskretisierungen in Raum- und Zeitrichtung. Markieren Sie hierbei die gegebenen Rand- und Anfangsbedingungen sowie die gesuchten Werte u_1^n, u_2^n, u_3^n.
Ergebnis:
∘ Randbedingungen
x Anfangsbedingung
$\Delta x = 1$
$\Delta t = \frac{1}{2}$



b) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen für u_t, u_x und mit zentralen Differenzen für u_{xx}. Formulieren Sie das explizite finite Differenzenverfahren und geben Sie hierbei auch die Rand- und Anfangsbedingungen in diskreter Form an.
Ergebnis:

$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t\Big(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} - 2\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} - x_i^2\Big)$
Randbed.: $u_0^n = 5; u_4^n = 3$; Anfangsbed.:$u_i^0 = 1; i = 1, 2, 3$

c) Berechnen Sie unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte u_1^1, u_2^1, u_3^1 der ersten Zeititeration.
Ergebnis:
$u_1^1 = -\frac{3}{2}, u_2^1 = -7; u_3^1 = -\frac{25}{2}$

Aufgabe 5: Numerisches Differenzieren

a) Zeigen Sie, dass die numerische Differenzenformel für die Berechnung der ersten Ableitung

$$D^{neu}f(x_0) = \frac{1}{2h}\Big(-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)\Big)$$

Polynome vom Grad zwei exakt differenziert.
Ergebnis:

$D^{neu}f(x_0) = 2ax_0 + b$

b) Bestimmen Sie für die Funktion $f(x) = \frac{3}{x-1}$ den Näherungswert der ersten Ableitung über die Differenzenformel $D^{neu}f(x)$ (aus Teil a)) an der Stelle $x_0 = 2$ und für eine Schrittweite von $h = 1/2$.
Ergebnis:

$D^{neu}f(2) = -\frac{5}{2}$

c) Bestimmen Sie für die Funktion in b) den Näherungswert der ersten Ableitung der rechtsseitigen Ableitung $D^+f(x)$, an der Stelle $x_0 = 2$ und für eine Schrittweite von $h = 1/2$.
Ergebnis:

$D^+f(2) = -2$

d) Berechnen Sie für die Funktion in b) den exakten Wert der Ableitung $f'(2)$ und geben Sie die Fehler e^{neu} und e^+ der Ergebnisse mit den Differenzenformeln D^{neu} und D^+ an.
Ergebnis:

$f'(2) = -3; e_{neu} = \mid -3 + \frac{5}{2} \mid = \frac{1}{2}$
$e_+ = \mid -3 + 2 \mid = 1$

Aufgabe 6: Anfangswertproblem

Gegeben ist die gewöhnliche Differenzialgleichung

$$y'(x) = 2x(y(x))^2 \qquad \text{mit} \quad y(0) = 1,\ x \geq 0.$$

a) Geben Sie die Eulersche Iterationsformel für diese Differenzialgleichung an.
Ergebnis:
$y_{k+1} = y_k + h(2x_k \cdot y_k^2)$
$y_0 = 1; x_0 = 0$
$x_k = a + k \cdot h$

b) Bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ die ersten beiden Iterationsschritte des Euler-Verfahrens.
Ergebnis:
$y_1 = 1; y_2 = \frac{3}{2}; x_1 = \frac{1}{2}$

c) Geben Sie das Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung für diese Differenzialgleichung an.
Ergebnis:
$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\left\{2x_k y_k^2 + 2x_{k+1}(y_k + h(2x_k y_n^2))^2\right\}$

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

$y_1 = \frac{5}{4}$

e) Zeigen Sie, dass $y(x) = \frac{1}{1+x^2}$ die Lösung des Anfangswertproblems ist und bestimmen Sie die Fehler des Euler-Verfahrens e^{Eu} und des Runge-Kutta Verfahrens e^{RK} eweils nach dem ersten Iterationsschritt.

Ergebnis:
$e^{Eu} = \frac{1}{5}$
$e^{RK} = \frac{3}{2}$

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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation 07. Juli 2015, SS 2015

Aufgabe 1: Nullstellenberechnung und Taylor-Formel
Gesucht ist eine Lösung der Gleichung $x^3 = 3$.

a) Formulieren Sie zunächst ein Nullstellenproblem der Form $f(x) = 0$. Verwenden Sie dann das Sekantenverfahren mit den Startwerten $x_1 = 1$ und $x_2 = 2$ und berechnen Sie den Wert des ersten Iterationsschrittes.

Ergebnis:
$x_3 = \frac{9}{7}$

b) Berechnen Sie für den Startwert $x_1 = 1$ den Wert des ersten Iterationsschrittes mit dem Newton-Verfahren.
Ergebnis:
$x_2 = \frac{5}{3}$

c) Vergleichen Sie beide Ergebnisse aus a) und b) mit dem exakten Wert $\sqrt[3]{3} = 1.44$.
Ergebnis:
$Sek. = 0,26$
$New. = 0,16$

d) Geben Sie die Taylor-Reihe von $g(x) = e^{\alpha x}$ mit dem Entwicklungspunkt $x_0 = 0$ bis zur vierten Ordnung an.
Ergebnis:
$g'(x) = \alpha e^{\alpha x}$
$g''(x) = \alpha^2 e^{\alpha x}$
$g(x) = 1 + \alpha x + \frac{\alpha^2}{2!}x^2 + \frac{\alpha^3}{3!}x^3 + \frac{\alpha^4}{4!}x^4 +$

e) Leiten Sie die Taylor-Reihe von $e^{\alpha x}$ aus d) gliedweise ab und zeigen Sie dadurch, dass für die Ableitung das Folgende gilt: $\left(e^{\alpha x}\right)' = \alpha e^{\alpha x}$.
Ergebnis:
$g'(x) = \alpha + 2\frac{\alpha^2}{2!}x + 3\frac{\alpha^3}{3!}x^2 + 4\frac{\alpha^4}{4!}x3 +$
$= \alpha(1 + \alpha x + \frac{\alpha^2}{2!}x^2 + \frac{\alpha^3}{3!}x^3 + ...)$
$= \alpha e^{\alpha x}$

Aufgabe 2: Polynom- und Spline-Interpolation

a) Berechnen Sie das Interpolationspolynom $p(x)$ für die Datenpunkte $(-1,-1)$, $(0,-1)$, $(1,2)$ und $(2,23)$ mit der Methode der dividierten Differenzen.
Ergebnis:
$a_0 = -1; a_1 = 0; a_2 = \frac{3}{2}; a_3 = 9; a_4 = \frac{5}{2}$
$p(x) = -1 + \frac{3}{2}(x+1)x + \frac{5}{2}(x+1)x(x-1)$

b) Bringen Sie das Polynom aus a) in die Form $p(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d$ und bestimmen Sie den Wert von $p(2)$ mit dem Horner-Schema.
Ergebnis:
$p(x) = \frac{5}{2}x^3 + \frac{3}{2}x^2 - x - 1$
$p(2) = 23$

c) Gegeben sind die Stützpunkte $(-1,-1)$, $(0,-1)$, und $(1,2)$. Bestimmen Sie mit der Zusatzbedingung $g_1'(-1) = 0$ für die gegebenen Stützpunkte eine quadratische Spline-Funktion der Form

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

Ergebnis:
$g_1(-1) = -1 \quad \alpha_{12} - \alpha_{11} + \alpha_{10} = -1$
$g_1(0) = -1 \quad \alpha_{10} = -1$
$g_2(0) = -1 \quad \alpha_{20} = -1$
$g_2(1) = 2 \quad \alpha_{22} - \alpha_{21} + \alpha_{20} = 2$
Diffbarkeit: $g_i'(x) = 2\alpha_{i2}x + \alpha_{i1}$
$g_1'(0) = g_2'(0) \quad \alpha_{11} = \alpha_{21}$
Zusatzbedingung: $g_1'(-1) = 0; -2\alpha_{12} + \alpha_{11} = 0$
$g_1(x) = -1$
$g_2(x) = 3x^2 - 1$

Aufgabe 3: Numerisches Integrieren

Gegeben ist die Funktion

$$f(x) = \frac{4}{1+x^2}.$$

a) Berechnen Sie den Wert der Untersumme für das Integral $\int_0^1 f(x)dx$.

Zerlegen Sie hierfür das Intervall [0, 1] in zwei Teilintervalle.
Ergebnis:
$I_U = \frac{18}{5}$

b) Bestimmen Sie nun den Wert des Integrals über die Trapezformel und

Ergebnis:
$I_T = \frac{31}{10}$

c) über die Simpson-Formel.
Ergebnis:
$I_T = \frac{47}{15}$

d) Vervollständigen Sie die Implementierung des Trapezverfahrens für `n` Stützstellen zwischen $[a, b]$ für die Funktion `f`:

```
double int_trapez(double (*f)(double), double a, double b, int n) {
```

```
double int_trapez(double (*f)(double), double a, double b, int n) {
  double h=(b-a)/n;
  double sum= 0.0;
  for (int i=0; i< n; i++){
    sum+=0.5*h*(f(a+h*i)+f(a+h*(i+1)));
}
return sum;
}
```

Aufgabe 4: Anfangswertproblem

Gegeben ist die Differenzialgleichung

$$y'(x) = \frac{x}{(y(x) \cdot (1 + x^2))}, y \neq 0$$

mit der Anfangsbedingung $y(0) = 1$.

a) Geben Sie die Eulersche Iterationsformel für diese Differenzialgleichung an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ die ersten beiden Iterationsschritte des Euler-Verfahrens.
Ergebnis:
$y_1 = 1$
$y_2 = \frac{6}{5}$

b) Geben Sie das Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung für die Differenzialgleichung an.
Ergebnis:
$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\left\{\frac{x_k}{y_k(1+x_k^2)} + \frac{x_{k+1}}{y_k+h(\frac{x_k}{y_k(1+x_k^2)})(1+x_{k+1}^2)}\right\}$

c) Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta Verfahrens zweiter Ordnung.
Ergebnis:
$y_1 = 1,1$

d) Schreiben Sie eine numerische Lösung mit dem Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung, indem Sie die Funktion

```
double solveRK2(double (*F)(double, double), double y0, double dx, in
  double y=y0;
  double x=0;
  for (int cnt=0; cnt < n; cnt++){
  M1=F(x,y);
  M2=F(x+dx,y+dx*M1);
  y+=0.5*dx*(M1+M2);
  printf("%lf %lf\n", x, y);
  x+=dx;
}
```

erweitern. Dabei ist $\mathtt{F}(x,y) = y'(x)$. `y0` der Startwert $y(0)$. `dx` die Schrittweite und `n` die Anzahl der Schritte.

Aufgabe 5: Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben sind die folgenden Messpunkte:

x_i	-1	0	1
y_i	1/2	7/2	7/2

Gesucht ist eine Ausgleichsfunktion der Form: $f(x) = ax^2 + bx + c$. Zur Bestimmung der Funktion $f(x)$ gehen Sie nach den folgenden Schritten vor:

a) Formulieren Sie das Fehlergleichungssystem $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.
Ergebnis:
$\vec{y} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 7/2 \\ 7/2 \end{pmatrix}$

b) Stellen Sie das Normalengleichungssystem $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$ auf.
Ergebnis:
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1/2 \\ 7/2 \\ 7/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 15/2 \end{pmatrix}$

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsfunktion $f(x) = ax^2 + bx + c$.

Ergebnis:
$b = \frac{3}{2}$
$c = \frac{7}{2}$
$a = -\frac{3}{2}$
$f(x) = -\frac{3}{2}x^2 + \frac{3}{2}x + \frac{7}{2}$

Aufgabe 6: Numerisches Differenzieren und partielle Differenzialgleichung

a) Zeigen Sie, dass die Differenzenformel

$$D^{neu}f(x_0) = \frac{1}{2h}\big(-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)\big)$$

bei äquidistanter Zerlegung Polynome vom Grad 2 der Form $f(x) = ax^2+bx+c$ exakt differenziert.
Ergebnis:
$f'(x) = 2ax_0 + b$

b) Bestimmen Sie für die Funktion $f(x) = x - \frac{4}{x}$ den Wert der ersten Ableitung mit der zentralen Differenzenformel $Df(x_0)$ und mit der neuen Differenzenformel $D^{neu}f(x_0)$, an der Stelle $x_0 = 1$, und für eine Schrittweite von $h = 1/2$.
Ergebnis:
$Df(x_0) = \frac{19}{3}$
$D^{neu}f(x_0) = \frac{13}{3}$

c) Diskretisieren Sie das folgende Raum-Zeit-Problem nach dem expliziten Differenzenverfahren: $u_t(t,x) = u_{xx}(t,x) + x^2$ mit $2 \leq x \leq 5$ und $t \geq 0$, mit den Randbedingungen $u(t,2) = 0$, $u(t,5) = 7$ und der Anfangsbedingung $u(0,x) = 1$ für $2 < x < 5$. Das numerische Gitter ist $\Delta x = 1$. Geben Sie hierbei auch die Rand- und Anfangsbedingungen in diskreter Form an.
Ergebnis:
$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + x_i^2)$
Randbed.:$u_0^n = 0; u_3^n = 7$
Anfangsbed.:$u_i^0 = 1$
$i = 1, 2$

d) Berechnen Sie für die größtmögliche Zeitschrittweite die beiden Werte u_1^1 und u_2^1 als Ergebnis der ersten Zeititeration.
Ergebnis:
$\Delta t \leqslant \frac{1}{2}$
$u_1^1 = 5$
$u_2^1 = 12$

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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation 02. Februar 2016, WS 2015/16

Aufgabe 1: Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben sind die die Messpunkte $(0,3)$, $(-1,1)$, $(0,2)$, $(1,2)$. Gesucht ist eine Ausgleichsparabel der Form: $f(x) = ax^2 + bx + c$ zu diesen Punkten. Zur Bestimmung der Funktion $f(x)$ gehen Sie nach den folgenden Schritten vor:

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

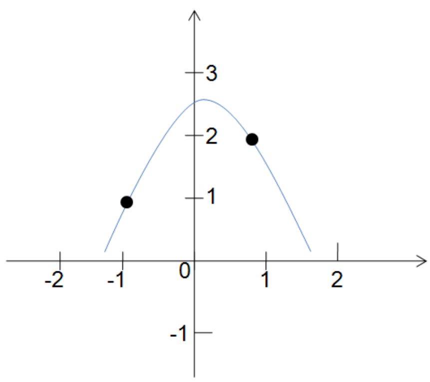
$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

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

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 8 \end{pmatrix}$$

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsfunktion $f(x) = ax^2 + bx + c$.
Ergebnis:
$f(x) = -x^2 + \frac{1}{2}x + \frac{5}{2}$

d) Skizzieren Sie die gegebenen Punkte sowie die Ausgleichsparabel.
Ergebnis:



Aufgabe 2: Numerisches Differenzieren, partielle Differenzialgleichung

a) Gegeben ist die Funktion $f(x) = x^2 + 4x - 2$. Berechnen Sie den Näherungswert der ersten Ableitung über die rechtseitige Differenzenformel $D^+f(x_0)$, an der Stelle $x_0 = 1$, und für eine Schrittweite von $h = 1/4$.

Ergebnis:
$D^+f(x_0) = \frac{(x_0+h)-f(x_0)}{h}$
$D^+f(1) = \frac{25}{4}$

b) Berechnen Sie mit der sog. Fünfpunkte-Mittelpunkt-Differenzenformel

$$\hat{D}f(x_0) = \frac{1}{12h}\Big\{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)\Big\}$$

den Näherungswert der ersten Ableitung $\hat{D}f(x_0)$ für die Funktion $f(x) = 4x^2 - 8x + 2$ an der Stelle $x_0 = 1$ und für eine Schrittweite von $h = 1/4$.

Ergebnis:
$\hat{D}f(x_0) = 0$

c) Diskretisieren Sie das folgende Raum-Zeit-Problem nach dem expliziten Differenzenverfahren:

$$u_t(t,x) = u_{xx}(t,x) - x \cdot u(t,x) \quad \text{für} \quad x \in [1,3] \quad \text{und} \quad t \geq 0$$

mit den Randbedingungen $u(t,1) = 3$, $u(t,3) = 0$ und der Anfangsbedingung $u(0,x) = 2$, $1 < x < 3$. Das Gitter ist so gewählt, dass $\Delta x = 1/2$ und $\Delta t = 1/4$ ist. Geben Sie hierbei auch die Rand- und Anfangsbedingungen in diskreter Form an.
Ergebnis:

$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t\Big\{\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} - x_i^n u_i^n\Big\}$
mit Rand $u_0^n = 3 \quad u_4^n = 0$
Anfang $u_i^0 = 2 \quad i = 1,2,3$

d) Berechnen Sie die Werte u_1^1, u_2^1 und u_3^1 als Ergebnis der ersten Zeititeration.

Ergebnis:
$u_1^1 = \frac{9}{4}$
$u_2^1 = 1$
$u_3^1 = -\frac{5}{4}$

Aufgabe 3: Numerisches Integrieren

Gesucht sind Näherungswerte für das Integral

$$I = \int_{-1}^{3} f(x)dx \quad \text{mit} \quad f(x) = 2x^2 - x.$$

Zerlegen Sie das Intervall [-1, 3] in vier Teilintervalle.

a) Berechnen Sie den Wert des Integrals durch Anwendung der Formel für die Mittelsumme I_M.
Ergebnis:
$I_M = 14$

b) Bestimmen Sie den Wert des Integrals über die Trapezformel I_T und:
Ergebnis:
$I_T = 16$

c) über die Simpson-Formel I_S.
Ergebnis:
$I_S = \frac{44}{3}$

d) Prüfen Sie durch Einsetzen der Ergebnisse aus a) - c), dass folgende Gleichheit gilt: $I_S = \frac{1}{3}\Big(2I_M + I_T\Big)$.
Ergebnis:
$I_S = \frac{44}{3}$

e) Vervollständigen Sie die Implementierung des Mittelpunktverfahrens, indem Sie die Funktion $f(x)$ unter Verwendung der C-Syntax und für `n` Stützstellen zwischen $[a, b]$ für die Funktion `f` definieren:

```
double f(...) { ... }
double int_mittel(double (*f)(double), double a, double b, int n) {

...
}
```

Ergebnis:

```
double f(double x) {return 2*x*x-x;}
double int_mittel(double (*f)(double), double a, double b, int n) {
 double h=(b-a)/n;
 double sum=0.0;
 for (int i=0; i< n; i++){
 sum+=h*f(a+h/2*(i+1));
 }
 return sum;
}
```

Aufgabe 4: Nullstellenberechnung
Gegeben ist die Funktion $f(x) = \frac{1}{8}x^4 - \frac{1}{2}x^2 + x - \frac{1}{4}$ und gesucht sind die Nullstellen der Gleichung $f(x) = 0$.

a) Bestimmen Sie die Ableitungsfunktion $f'(x)$.
Ergebnis:
$f'(x) = \frac{1}{2}x^3 - x + 1$

b) Berechnen Sie mit dem Newton-Verfahren für den Startwert $x_0 = 1$ den Wert des ersten Iterationsschrittes.
Ergebnis:
$x_1 = \frac{1}{4}$

c) Verwenden Sie dann das Sekantenverfahren mit den Startwerten $x_0 = 1$ und $x_a = 2$ und berechnen Sie den Wert des ersten Iterationsschrittes.
Ergebnis:
$x_2 = \frac{8}{11}$

d) Vervollständigen Sie die Implementierung des Sekantenverfahrens zur Nullstellensuche:

```
double sekanten(double (*f)(double), double a, double b) {
    ...
}
```

Die Funktion sekanten erwartet die Funktion f sowie zwei Startwerte a und b. Ihr Rückgabewert ist die gefundene Nullstelle mit einer Genauigkeit von 1e−12. Bemerkung: y=f(x) gibt den Funktionswert an der Stelle x zurück. Beenden Sie die Funktion mit dem Wert NaN, falls keine Konvergenz vorliegt (etwa nach 100 Iterationsschritten).

Ergebnis:

```
double sekanten(double (*f)(double), double a, double b) {
 double err=1e-12;
 int i=0;
 double x_alt;
 do {
 x_alt=b;
 b -=f(b)*(b-a)/f(b)-f(a));
 a=x_alt;
 if(i++>100) return NAN;
 } while (fabs(b-a)>err);
 return x;
 }
```

Aufgabe 5: System gewöhnlicher Differenzialgleichungen

Gegeben ist das Differenzialgleichungssystem

$$\begin{aligned} y_1'(x) &= 2xy_1(x) + y_2(x) \\ y_2'(x) &= (x-2)y_2(x) \end{aligned}$$

mit der Anfangsbedingung $y_1(0) = 1$ und $y_2(0) = 2$.

a) Geben Sie die Euler'sche Iterationsformel für diese Differenzialgleichung an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ die ersten beiden Iterationsschritte des Eulerverfahrens.
Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + h\{2x_k y_{1,k} + y_{2,k}\}$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + h\{(x_k - 2)y_{2,k}\}$
$y_{1,1} = 2$
$y_{2,1} = 0$
$y_{1,2} = 3$
$y_{2,2} = 0$

b) Geben Sie das Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung für die Differenzialgleichung an.
Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + \frac{h}{2}\Big\{f_1(x_k, y_{1,k}, y_{2,k}) + f_1(x_{k+1}, y_{1,k} + hf_1(x_k, y_{1,k}, y_{2,k}) + y_{2,k} + hf_2(x_k, y_{1,k}, y_{2,k}))\Big\}$

$y_{2,k+1} = y_{2,k} + \frac{h}{2}\Big\{f_2(x_k, y_{1,k}, y_{2,k}) + f_2(x_{k+1}, y_{1,k} + hf_1(x_k, y_{1,k}, y_{2,k}) + y_{2,k} + hf_2(x_k, y_{1,k}, y_{2,k}))\Big\}$

c) Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta Verfahrens zweiter Ordnung.
Ergebnis:
$y_{1,1} = 2$
$y_{2,1} = 1$

Aufgabe 6: Taylor-Formel und Spline-Interpolation

a) Entwickeln Sie die Funktion $f(x) = \ln(1+x)$ in eine Taylor-Reihe um den Entwicklungspunkt $x_0 = 0$ bis zur vierten Ordnung (Hinweis: $\ln(1) = 0$ und $(\ln(x))' = 1/x$).
Ergebnis:
$f(x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4$

b) Bringen Sie das Polynom aus a) in die Form $f(x) = ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx + e$ und bestimmen Sie den Wert von $f(2)$ mit dem Horner-Schema.

Ergebnis:
$x_0 = 2$

$$\begin{array}{cccccc} -\frac{1}{6} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 & 0 & \\ & -\frac{1}{3} & 0 & -1 & 0 & \\ \hline -\frac{1}{6} & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 = & f(2) \end{array}$$

c) Entwickeln Sie die Funktion $g(x) = \frac{1}{1+x}$ in eine Taylor-Reihe um den Entwicklungspunkt $x = 0$ und zeigen Sie durch gliedweises Ableiten der Taylor-Reihe von $\ln(1+x)$ aus a), dass Folgendes gilt: $\Big(\ln(1+x)\Big)' = \frac{1}{1+x}$.
Ergebnis:
$f'(x) = 1 - x + x^2 - x^3$

d) Gegeben sind die Stützpunkte $(0,0)$, $(1,1)$, $(2,0)$ und $(3,-2)$. Bestimmen Sie mit der Zusatzbedingung $g_1'(0) = 1$ für die gegebenen Stützpunkte eine quadratische Spline-Funktion der Form

$$g(x) = \begin{cases} g_1(x) = a_{12}x^2 + a_{11}x + a_{10} & \text{für} \quad 0 \leq x \leq 1 \\ g_2(x) = a_{22}x^2 + a_{21}x + a_{20} & \text{für} \quad 1 \leq x \leq 2 \\ g_3(x) = a_{32}x^2 + a_{31}x + a_{30} & \text{für} \quad 2 \leq x \leq 3 \end{cases}$$

Ergebnis:

$$g(x) = \begin{cases} x & \text{für} \quad 0 \leq x \leq 1 \\ -2x^2 + 5x - 2 & \text{für} \quad 1 \leq x \leq 2 \\ x^2 - 7x + 10 & \text{für} \quad 2 \leq x \leq 3 \end{cases}$$

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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation 05. Juli 2016, SS 2016

Aufgabe 1: Interpolationspolynom und Splines
Gegeben sind die folgenden Messdaten eines Prozessablaufs:

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

a) Bestimmen Sie mit Hilfe des Newton-Algorithmus das Interpolationspolynom, das die Messdaten verbindet.
Ergebnis:
$a_0 = -1$
$a_1 = 2$
$a_2 = 8$
$a_3 = \frac{1}{2}$
$p(x) = -1 + 2(x+1) + 8(x+1)x + 8(x+1)x(x-\frac{1}{2})$

b) Betrachten Sie nur die ersten drei Stützpunkte an den Stellen $x_1 = -1, x_2 = 0$ und $x_3 = \frac{1}{2}$. Bestimmen Sie mit der Zusatzbedingung $g_1'(-1) = 1$ die quadratische Spline-Funktion

$$g(x) = \begin{cases} g_1(x) = a_{12}x^2 + a_{11}x + a_{10} & \text{für} \quad -1 \le x \le 0 \\ g_2(x) = a_{22}x^2 + a_{21}x + a_{20} & \text{für} \quad 0 \le x \le 1/2 \end{cases}.$$

Ergebnis:
$g_1(-1) = -1$
$g_1(0) = 1$
$g_2(0) = 1$
$g_2(\frac{1}{2}) = 8$
$g_1'(0) = g_2'(0)$
$g_1'(-1) = 1$
$g_i' = 2a_{i2}x + a_{i1}$
$g_1(x) = x^2 + 3x + 1$
$g_2(x) = 22_x^2 + 3x + 1$

Aufgabe 2: Gewöhnliche Differenzialgleichungen

Gegeben ist das Differenzialgleichungssystem

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= -y_1(t) - y_2(t) \\ y_2'(t) &= -t\, y_2(t) \end{aligned}$$

mit der Anfangsbedingung $y_1(0) = 1$ und $y_2(0) = 2$.

a) Geben Sie die Eulersche Iterationsformel für diese Differenzialgleichung an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Euler-Verfahrens.

Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + h\Big\{ - y_{1,k} - y_{2,k}\Big\}$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + h\Big\{ - t_k y_{2,k}\Big\}$
$t_k = a + kh \quad t_0 = 0, t_1 = \frac{1}{2}, t_2 = 1, ...$
$y_{1,0} = 1$
$y_{2,0} = 2$
$y_{1,1} = -\frac{1}{2}$
$y_{2,1} = 2$

b) Geben Sie das Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung für die Differenzialgleichung an. Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta-Verfahrens zweiter Ordnung.

Ergebnis:
$y_{1,1} = -\frac{1}{8}$
$y_{2,1} = \frac{7}{4}$

Aufgabe 3: Taylor-Reihe und numerisches Integrieren

Gegeben ist die Funktion $f(x) = \frac{1}{4}x^2 - 3x + 1$. Zerlegen Sie das Intervall [0, 4] in vier Teilintervalle.

a) Entwickeln Sie die Funktion $f(x)$ in eine Taylor-Reihe um $x_0 = 2$.

Ergebnis:

$f(2) = -4$
$f'(x) = \frac{1}{2}x - 3 \quad f'(2) = -2$
$f''(x) = \frac{1}{2} \quad f''(2) = \frac{1}{2}$
$f(x) = -4 - 2(x-2) + \frac{1}{4}(x-2)^2$

b) Berechnen Sie den Näherungswert des Integrals für die Untersumme I_U.

Ergebnis:
$I_U = -\frac{21}{2}$

c) Bestimmen Sie den Wert des Integrals über die Trapezformel I_T.

Ergebnis:
$I_T = -\frac{29}{2}$

d) Bestimmen Sie den Wert des Integrals über die Simpson-Formel I_S.

Ergebnis:
$I_S = -\frac{44}{3}$

Aufgabe 4: Raum-Zeit-Probleme
Gegeben ist die partielle Differenzialgleichung

$$u_t(t,x) = u_{xx}(t,x) - u_x(t,x) + 4u(t,x) \quad \text{für} \quad x \in [0,2] \quad \text{und} \quad t \geq 0$$

mit den Randbedingungen $u(t,0) = 2$, $u(t,2) = 4$ und der Anfangsbedingung $u(0,x) = 1$ für $0 < x < 2$. Das Gitter ist so gewählt, dass $\Delta x = 1/2$ und $\Delta t = 1/4$ ist.

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und mit zentralen Differenzen in der Ortskoordinate x. Stellen Sie die Formel für das explizite Differenzenverfahren auf. Geben Sie hierbei auch die Randbedingungen und die Anfangsbedingung in diskreter Form an.
Ergebnis:
$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \left\{ \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_i^n}{(\Delta x)^2} - \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} + 4u_i^n \right\}$
$RB: u_0^n = 2 \quad u_4^n = 4$
$AB: u_i^0 = 1 \quad i = 1,2,3$

b) Berechnen Sie die Werte $u_i^1, i = 1,2,3$ der ersten Zeititeration im Raum-Zeit-Gitter unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens.
Ergebnis:
$u_1^1 = \frac{13}{4}$
$u_2^1 = 2$
$u_3^1 = \frac{17}{4}$

c) Welche Werte nimmt $u(t,x)$ an den Stellen u_0^1 und u_4^1 an ?

Ergebnis:
$u_0^1 = 2; u_4^1 = 4$

Aufgabe 5: Horner-Schema, numerisches Differenzieren und Nullstellen
Gegeben ist die Funktion $f(x) = \frac{1}{2}x^4 - 4x^2 + x$.

a) Berechnen Sie an der Stelle $x_0 = 2$ den Funktionswert $f(2)$, unter Verwendung des Horner-Schemas.
Ergebnis:
$x_0 = 2$

1/2	0	-4	1	0
	1	2	-4	-6
1/2	1	-2	-36=f(2)	

b) Bestimmen Sie die numerischen Werte der ersten und zweiten Ableitung an der Stelle $x_0 = 0$ unter Verwendung der zentralen Differenzenformeln $Df(x)$

und $D^2f(x)$, mit einer Schrittweite von $h = 1$.
Ergebnis:
$Df(x) = 1$
$D^2f(x) = -7$

c) Werwenden Sie das Sekantenverfahren zur Bestimmung der Nullstelle $f(x) = 0$ mit Startwerten $x_0 = 1$ und $x_1 = 2$ und berechnen Sie den Wert des ersten Iterationsschrittes.
Ergebnis:
$x_2 = x_0 - f(x_0)\frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)}$
$x_2 = \frac{2}{7}$

d) Berechnen Sie für den Startwert $x_0 = 2$ den Wert des ersten Iterationsschrittes mit dem Newton-Verfahren.
Ergebnis:
$x_1 = 8$

e) Vervollständigen Sie die Implementierung des Newton-Verfahren zur Nullstellensuche:

```
double newton(double (*f)(double), double (*df)(double), double x0) {
```

Die Funktion newton erwartet die Funktion f und deren Ableitung df sowie einen Startwert x_0. Ihr Rückgabewert ist die gefundene Nullstelle mit einer Genauigkeit von 1e−12. Bemerkung: y=f(x) gibt den Funktionswert an der Stelle x zurück. Beenden Sie die Funktion mit dem Wert NaN, falls keine Konvergenz vorliegt (etwa nach 100 Iterationsschritten).

Ergebnis:

```
  double err=1e-12;
  int i=0;
  double xalt;
  do{
    xalt=x;
    x-=f(x)/df(x);
  if (i++>100)return NAN;
  } while (fabs(x-xalt)>err);
  return x;
}
```

Aufgabe 6: Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben sind die Messpunkte $(-\frac{1}{2}, 1)$, $(1, 3)$ und $(\frac{1}{4}, 2)$. Gesucht ist eine Ausgleichsfunktion der Form:

$$f(x) = a\left(\frac{1}{x}\right) + b$$

zu diesen Punkten. Zur Bestimmung der Funktion $f(x)$ gehen Sie nach den folgenden Schritten vor:

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

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

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

$$A^T A = \begin{pmatrix} 21 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix}$$

$$A^T y = \begin{pmatrix} 9 \\ 6 \end{pmatrix}$$

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsfunktion $f(x) = a\left(\frac{1}{x}\right) + b$.
Ergebnis:
$a = \frac{29}{42}$
$b = \frac{11}{6}$

d) Vervollständigen Sie die Implementierung des Normalgleichungssystems. Die Rückgabewerte der Ansatzfunktionen f1 und f2 sind anzugeben.

```
double f1(double x) {
  ...
  return ...;
}
double f2(double x) {
  ....
}
int main(int argc, char* argv[]){
int N = 3;
double x[N] = {-1/2,1,1/4};
double y[N] = {1,3,2};
  ...
}
```

Ergebnis:

```
double f1(double x) {return 1,0/x;}
double f2(double x) {return 1,0;}

int main(int argc, char* argv[]){
int N = 3;
double x[N] = {-1/2,1,1/4};
double y[N] = {1,3,2};
doubl lambda1=0,0;
doubl lambda2=0,0;
double a11=0.0,a12=0.0, a22=0.0;
double y1=0.0, y2=0.0;
int i;
```

```
for(i=0;i<N;i++){
a11+=f1(x[i])*f1(x[i]);
a12+=f1(x[i])*f2(x[i]);
a22+=f2(x[i])*f2(x[i]);
y1+=y[i]*f1(x[i]);
y2+=y[i]*f2(x[i]);
}
lambda1=(a22*y1-a12*y2)/a11*a22-a12*a12);
lambda2=(a11*y2-a12*y1)/a11*a22-a12*a12);
```

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

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

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 Eulersche Iterationsformel für das Differenzialgleichungssystem an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ die ersten beiden Iterationsschritte.
Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + h(-x_k y_{1,k})$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + h(-y_{1,k} - y_{2,k})$
$y_{1,1} = 2$
$y_{2,1} = -1$
$y_{1,2} = \frac{3}{2}$
$y_{2,2} = -\frac{3}{2}$

b) Geben Sie das Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung für das Differenzialgleichungssystem an.
Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + \frac{h}{2}(-x_{1,k} y_{1,k} - x_{1,k+1}(y_{1,k} + h(-x_k y_{1,k}))$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + \frac{h}{2}(-y_{1,k} - y_{2,k} - (y_{1,k} + h(-x_k y_{1,k})) - (y_{2,k} + h(-y_{1,k} - y_{2,k}))$

c) Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta-Verfahrens zweiter Ordnung.
Ergebnis:
$y_{1,1} = \frac{7}{4}$
$y_{2,1} = -\frac{3}{4}$

Aufgabe 2: Interpolationspolynome, Taylor-Reihe 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.
Ergebnis:

$a_0 = -1$
$a_1 = 2$
$a_2 = 8$
$a_3 = 8$
$P(x) = -1 + 2(x+1) + 8(x+1)x + 8(x+1)x(x - \frac{1}{2})$

b) Gegeben ist die Funktion $f(x) = (1+2x)^3$. Entwickeln Sie die Funktion $f(x)$ an der Stelle $x_0 = 0$ in eine Taylor-Reihe.
Ergebnis:
$f(x) = 1 + 6x + 12x^2 + 8x^3$

c) Vergleichen Sie das Ergebnis des Interpolationspolynoms $p(x)$ aus Aufg. 2 a) mit der Taylor-Reihe aus Aufg. 2 b) (Hilfe: Ausmultiplizieren).
Ergebnis:
$f(x) = 1 + 6x + 12x^2 + 8x^3$

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 $h = 0.5$.
Ergebnis:
$D_1^+ f(x_0) = 26$
$D_2^+ f(x_0) = 14$

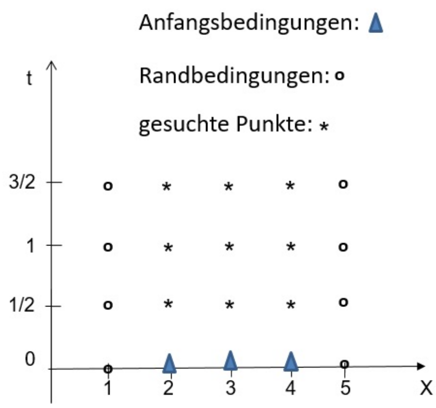
e) Berechnen Sie den Wert der ersten Ableitung $f'(x)$ an der Stelle $x_0 = 0$ und geben Sie für die beiden Schrittweiten h aus Aufg. 2 d) den jeweiligen Fehler $e(h) = |D^+f(x_0) - f'(x_0)|$ an.
Ergebnis:
$e(h_1) = 20$
$e(h_2) = 8$

Aufgabe 3: Partielle Differenzialgleichung und Taylor-Formel

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 den Randbedingungen $u(t,1) = 0$, $u(t,5) = 4$ und der Anfangsbedingung $u(0,x) = 1$.

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und mit 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.
Ergebnis:
$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t\Big(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}(1 - x_i)\Big)$
RB: $u_0^n = 0, \quad u_4^n = 4, \quad$ AB: $u_i^0 = 1$ fr $i = 1, 2, 3$

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



c) Berechnen Sie unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte u_1^1, u_2^1, u_3^1 der ersten Zeititeration.
Ergebnis:
$u_1^1 = \frac{1}{4}, u_2^1 = 1, u_3^1 = \frac{1}{4}$

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 $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.

Ergebnis:

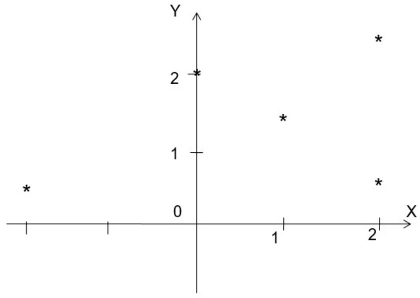
$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -2 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 2 \\ 3/2 \\ 5/2 \end{pmatrix}$$

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

$$\begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 13/2 \end{pmatrix}$$

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsparabel $f(x) = a + bx$.
Ergebnis:
$f(x) = \frac{143}{112} + \frac{23}{112}x$

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



Ergebnis:

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 $h(x) = 0$.
Ergebnis:
$h(x) = x^3 - 2x - 1$

b) Skizzieren Sie für die Startwerte $x_1 = 0$ und $x_2 = 2$ den Bisektionsalgorithmus mit (i) Initialisierung, (ii) Iteration und (iii) Abbruch.
Ergebnis:
(i)$x_l = x_1$
$x_r = x_2$
(ii)$x_m = \frac{1}{2}(x_l + x_r)$
wenn $h(x_m)h(x_l) < 0$
$x_r = x_m$
sonst $x_l = x_m$
(iii) wenn $(x_r - x_l)$ <fehler
abbruch
sonst (ii)

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).
Ergebnis:
$x_3 = \frac{1}{2}$

d) Stellen Sie nun die Newton-Formel auf und berechnen Sie für den Startwert $x_0 = 1$ den ersten Iterationsschritt.
Ergebnis:
$x_1 = 3$

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

$I_S = 44$

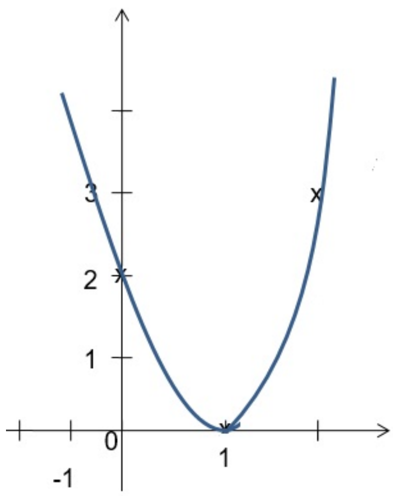
f) Implementieren Sie die Simpson-Formel für `n` Stützstellen im Intervall $[a, b]$ unter Verwendung der C-Syntax und wenden Sie die Funktion auf $h(x)$ aus Aufg. 5 e) an:
Ergebnis:

```
double h(...) { ... }
double int_simpson(double (*h)(double), double a, double b, int n) {
double h_1=(b-a)/n;\\
double sum=0.0;\\
for(int i=0,i<n,i++){
sum+=h6*(h(a+h*i)+4*h(a+h/2*(2*i+1)+h(a+h*(i+1))
}
return sum
}
```

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 $[1, 2]$.
Ergebnis:



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

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

Ergebnis:
$g_1(0) = 2 \quad g_2(1) = 0$
$g_1(1) = 0 \quad g_2(2) = 3$
$g_1'(1) = g_2'(4)$
$g_1''(1) = g_2''(1)$
$g_1''(0) = 0$
$g_2''(0) = 0$
$g_1'(x) = 3a_{13}x^2 + 2a_{12}x + a_{11}$
$g_1''(x) = 6a_{13}x + 2a_{12}$
$g_2'(x) = 3a_{23}x^2 + 2a_{22}x + a_{21}$
$g_2''(x) = 6a_{23}x + 2a_{22}$
$g_1(0) = 2 \quad a_{10} = 2$
$g_1(1) = 0 \quad a_{13} + a_{11} = -2$
$g_2(1) = a_{23} + a_{21} + a_{20} = 0$
$g_2(2) = 8a_{23} + 2a_{21} + a_{20} = 3$
Differenzierbarkeit: $g_1'(1) = g_2'(1) \quad 3a_{13} + a_{11} = 3a_{23} + a_{21}$
$g_1''(1) = g_2''(1) = 6a_{13} = 6a_{23}$
$g_1''(0) = 0 \quad a_{12} = 0$
$g_2''(0) = 0 \quad a_{22} = 0$

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.
Ergebnis:
double a[N] i
for (int i=0;i¡ N; i++)
a[i]=0.0;
for (int i=0; i¡N; j++)
a[i]+=Min v[i][j]*y[j]i

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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation 11. Juli 2017, SS 2017

Aufgabe 1: Interpolationspolynome, Horner-Schema und Differenzenformeln

a) Gegeben sind folgende Messdaten eines Prozessablaufs:

x_k	0	1	2	3
y_k	4	1	0	2

Bestimmen Sie mit Hilfe des Newton-Algorithmus das Interpolationspolynom $p(x)$, das die Messdaten verbindet.
Ergebnis:
$a_0 = 4; a_1 = -3; a_2 = 1; a_3 = \frac{1}{6}$
$p(x) = 4 - 3x + x(x-1) + \frac{1}{6}x(x-1)(x-2)$

b) Prüfen Sie, dass das Interpolationspolynom $p(x)$ mit der Funktion $f_3(x) = \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{11}{3}x + 4$ übereinstimmt.
Ergebnis:
$\frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{11}{3}x + 4 = f_3(x)$

c) Berechnen Sie mit Hilfe des Horner-Schemas das Restpolynom zweiten Grades $f_2(x)$, das sich durch Abspalten des Linearfaktors $(x-2)$ aus der Funktion $f_3(x)$ (Aufgabenteil 1b)) ergibt.
Ergebnis:
$\frac{1}{6}x^2 + \frac{5}{6}x - 2 = f_2(x)$

d) Bestimmen Sie die rechtsseitige Ableitung $D^+f_2(x)$ der Funktion $f_2(x) = \frac{1}{6}x^2 + \frac{5}{6}x - 2$ an der Stelle $x_0 = 0$ für zwei Schrittweiten $h = 1$ und $h = 1/25$.
Ergebnis:
$D^+f_2(0) = \frac{1}{h}\Big\{f_2(h) - f_2(0)\Big\}$
$h = 1 \quad D^+f_2(0) = 1; \quad h = \frac{1}{2} \quad D^+f_2(0) = \frac{11}{12}$

e) Berechnen Sie den Wert der ersten Ableitung $f_2'(x)$ an der Stelle $x_0 = 0$ und geben Sie für die beiden Schrittweiten h aus Aufg. 1 d) den jeweiligen Fehler $e(h) = |D^+f_2(x_0) - f_2'(x_0)|$ an.

Ergebnis:
$e(1) = \frac{1}{6}$
$e(\frac{1}{2}) = \frac{1}{12}$
$e(\frac{1}{25}) = \frac{1}{150}$

Aufgabe 2: Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben sind die Messpunkte $(-\frac{1}{2}, 6)$, $(\frac{1}{4}, 1)$ und $(1, 0)$. Gesucht ist eine Ausgleichsfunktion der Form:

$$f(x) = a\left(\frac{1}{x}\right) + b$$

zu diesen Punkten. Zur Bestimmung der Funktion $f(x)$ gehen Sie nach den folgenden Schritten vor:

a) Formulieren Sie das Fehlergleichungssystem $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.
Ergebnis:
$$\begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 4 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

b) Stellen Sie das Normalengleichungssystem $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$ auf.
Ergebnis:
$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 21 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix}$$
$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} -8 \\ 7 \end{pmatrix}$$

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsfunktion $f(x) = a\left(\frac{1}{x}\right) + b$.

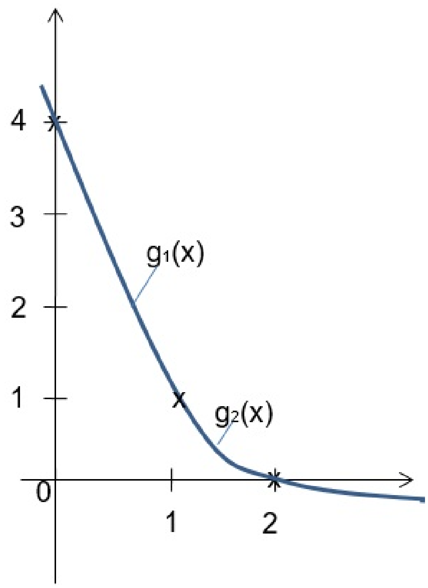
Ergebnis:
$f(x) = -\frac{5}{6x} + \frac{19}{6}$

Aufgabe 3: Quadratische Splines

Gegeben sind die Stützpunkte $(0, 4)$, $(1, 1)$, und $(2, 0)$.

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

Ergebnis:



b) Bestimmen Sie mit der Randbedingung $g_1'(0) = 1$ und für die gegebenen Stützpunkte die quadratische Spline-Funktion

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

Ergebnis:
$g_1(0) = 4 \quad a_{10} = 4$
$g_1(1) = 1 \quad a_{12} + a_{11} + a_{10} = 1$
$g_2(1) = 1 \quad a_{22} + a_{21} + a_{20} = 1$
$g_2(2) = 0 \quad 4a_{22} + 2a_{21} + a_{20} = 0$
$g_1'(0) = 1$
$a_{11} = 1$
$g_1'(1) = g_2'(1)$
$2a_{12} + a_{11} = 2a_{22} + a_{21}$
$a_{20} = 14$
$a_{10} = 4$
$a_{12} = -4$
$g_1'(x) = -4x^2 + x + 4$
$a_{21} = -19$
$a_{22} = 6$
$g_2(x) = 6x^2 - 19x + 14$

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

Ergebnis:
$g_1(1) = 1$
$g_2(1) = 1$

Aufgabe 4: System gewöhnlicher Differenzialgleichungen

Gegeben ist das Differenzialgleichungssystem

$$\begin{aligned} y_1'(x) &= y_1(x) \cdot \left(1 - \frac{1}{x+1}\right) \\ y_2'(x) &= 2y_2(x) - y_1(x)y_2(x) \end{aligned}$$

mit der Anfangsbedingung $y_1(0) = 1$ und $y_2(0) = 2$.

a) Geben Sie die Eulersche Iterationsformel für das Differenzialgleichungssystem an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt.
Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + h(y_{1,k}(1 - \frac{1}{x_k+1}))$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + h\{2y_{2,k} - y_{1,k}y_{2,k}\}$
$x_k = a + kh$
$y_{1,1} = 1$
$y_{2,1} = 3$

b) Geben Sie das Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung für das Differenzialgleichungssystem an.
Ergebnis:
$y_{1,k+1} = y_{1,k} + \frac{h}{2}\{[(y_{1,k}(1 - \frac{1}{x_k+1}) + [y^{Eul}_{1,k+1}(1 - \frac{1}{x_{k+1}} + 1)]\}$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + \frac{h}{2}\{(2y_{2,k} - y_{1,k}y_{2,k} + (2y^{Eul}_{2,k+1} - y^{Eul}_{1,k+1}y^{Eul}_{2,k+1})\}$

c) Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta-Verfahrens zweiter Ordnung.
Ergebnis:
$y_{1,1} = \frac{13}{12}; \quad y_{2,1} = \frac{13}{4}$

Aufgabe 5: Numerische Integration und Nullstellenbestimmung

Gegeben ist die Funktion $f(x) = x^3 - 2x^2 + x$.

a) Berechnen Sie den Wert der Untersumme für das Integral $\int_1^3 f(x)\,dx$. Zerlegen Sie hierfür das Intervall $[1, 3]$ in zwei gleiche Teilintervalle.
Ergebnis:
$I_U = 2$

b) Bestimmen Sie für die Schrittweite h aus a) den Wert der Trapezformel
Ergebnis:
$I_T = 8$

c) und der Simpson-Formel.
Ergebnis:
$I_S = \frac{20}{3}$

d) Berechnen Sie zur Bestimmung der Nullstelle von $f(x) = 0$ für den Startwert $x_0 = 1/2$ den ersten Iterationsschritt mit dem Newton-Verfahren.
Ergebnis:
$x_1 = 1$

e) Verwenden Sie die Startwerte $x_1 = -1$ und $x_2 = 1/2$ und bestimmen Sie den ersten Iterationsschritt des Bisektionsverfahrens. Geben Sie das Intervall des nächsten Interationsschrittes an.
Ergebnis:
(i)
$x_3 = -\frac{1}{4}$
(ii)
$f(x_3) = -\frac{1}{64} - \frac{2}{16} - \frac{1}{4} < 0$
(iii)
$f(x_3)f(x_2) \leq 0$
$I_{neu} = [-1/4, 1/2]$

ogrammieraufgabe: f) Vervollständigen Sie die Implementierung des Bisektionsverfahrens zur Nullstellensuche:

Ergebnis:

```
double bisektion(double (*f)(double), double x1, double x2) {
  double delta=1.0 e-12;
  double x_neu=0.0;
  int i=0;
  do{
  x_neu=0.5*(x1+x2);
  if (f(x_neu)*f(x2)<=0.0){x1=x_neu;}
  else {x2=x_neu;}
  i=i+1;}
  while (i<100 fabs (x2-x1))>delta);
  if (i=100) {return NaNi}}// bei i=100, Abbruch von do {...}...
  if(i<100) {return x_neui}// Abbruch von do {...} durch Knvergenz
  }
```

Die Funktion bisektion erwartet die Funktion f und die beiden Startwerte x1 und x2. Ihr Rückgabewert ist die Nullstelle mit einer Genauigkeit von 1e−12. Die Funktion f(x) muss nicht angegeben werden. Beenden Sie die Routine mit dem Wert NaN, falls keine Konvergenz vorliegt.

Aufgabe 6: Partielle Differenzialgleichung

Gegeben ist das Raum-Zeit-Problem $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1-u) + x(1-x)$ für $2 \le x \le 5$ und $t \ge 0$ mit den Randbedingungen $u(t,2) = 3$, $u(t,5) = 0$ und der Anfangsbedingung $u(0,x) = 1$ für $2 < x < 5$.

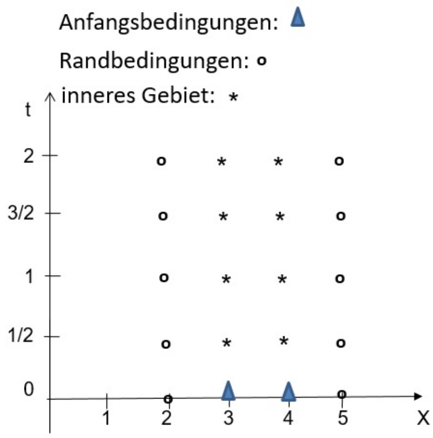
a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und mit zentralen Differenzen im Ort x. Wählen Sie $\Delta x = 1$ und $\Delta t = 1/2$. Formulieren Sie das explizite finite Differenzenverfahren und geben Sie die Randbedingungen und die Anfangsbedingung in diskreter Form an.

Ergebnis:
$u_i^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n + u_i^n(1-u_i^n) + x_i(1-x_i)) + u_i^n$
$u_0^n = 3$
$u_3^n = 0$
$u_i^0 = 1, i = 1, 2$

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

Ergebnis:

c) Berechnen Sie unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte u_1^1, u_2^1 der ersten Zeititeration. Geben Sie die beiden Vektoren $\mathbf{u}^0 = (u_0^0, \ldots, u_3^0)$ und $\mathbf{u}^1 = (u_0^1, \ldots, u_3^1)$ an.



Ergebnis:
$u_1^1 = -1$
$u_2^1 = -\frac{11}{2}$
$u_i^0 = (3, 1, 1, 0)$
$u_1^1 = (3, -1, \frac{11}{2}, 0)$

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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation
6. Februar 2018, WS 2017/2018

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

Aufgabe 1: (Interpolationspolynome, Nullstellen, Splines)

a) Gegeben sind folgende Messdaten eines Prozessablaufs:

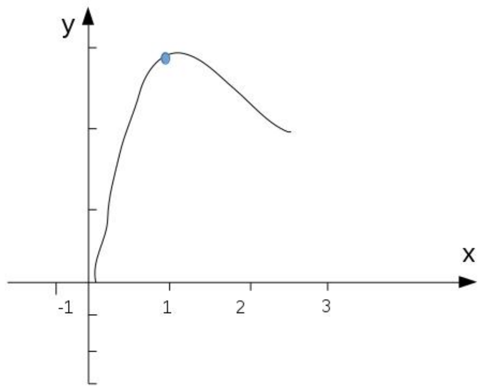
x_k	0	1	3
y_k	1	3	2

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

Ergebnis:
$a_0 = 1$
$a_1 = 2$
$a_2 = -\frac{5}{6}$
$f(x) = 1 + 2(x-0) - \frac{5}{6}(x-0)(x-1)$

b) Um eine Lösung der Gleichung $p(x) = 0$ zu bestimmen, berechnen Sie nun mit dem Startwert $x_0 = 1$ den ersten Iterationsschritt des Newton-Verfahrens zur Nullstellenbestimmung (Hinweis: Verwenden Sie $p(x) = 1 + \frac{17}{6}x - \frac{5}{6}x^2$)
Ergebnis:
$p'(x) = \frac{17}{6} - \frac{10}{6}x$
$x_1 = -\frac{11}{7}$

c) Skizzieren Sie in einem $x - g(x)$ Diagramm das Vorgehen zur Bestimmung der Spline-Funktion $g(x)$ in den Teilintervallen $[0, 1]$ und $[1, 3]$. **Ergebnis:**



d) Bestimmen Sie außerdem mit der Zusatzbedingung $g_1'(0) = 1$ für die gegebenen Stützpunkte eine quadratische Spline-Funktion:

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

Ergebnis:
$a_{12} = 1$
$a_{11} = 1$
$a_{10} = 1$
$g_1'(1) = 2 + 1 = g_2'(1)$
$a_{22} = -\frac{7}{4}$
$a_{21} = \frac{13}{2}$
$a_{20} = -\frac{7}{4}$

Aufgabe 2: (Numerische Integration)

Gegeben ist die Funktion

$$f(x) = \frac{2x^2}{1 + x}$$

Gesucht ist ein Näherungswert des Integrals über die Funktion $f(x)$ im Intervall $[1, 3]$, d.h. für $\int_1^3 f(x)dx$. Teilen Sie das Intervall I in zwei gleiche Teilintervalle I_1 und I_2. Berechnen Sie den numerischen Wert des Integrals

a) mit der Trapezformel und
Ergebnis:
$I_1 = [1; 2]$ und $I_2 = [2; 3]$
$f_1 = 1 \quad f_2 = \frac{8}{3} \quad f_3 = \frac{9}{2}$
$\int_1^3 f(x)dx = \frac{65}{12}$

b) mit der Simpsonformel.
Ergebnis:
$\int_1^3 f(x)dx = \frac{97}{18}$

Aufgabe 3: (Lineares Ausgleichsproblem)

Zu folgenden Messdaten soll die Ausgleichsgerade bestimmt werden.

x_i	-1	1	3	5	7
y_i	6	2	0	0	-3

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

Ergebnis:

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 5 & 1 \\ 7 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und y} = \begin{pmatrix} 6 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \\ -3 \end{pmatrix}$$

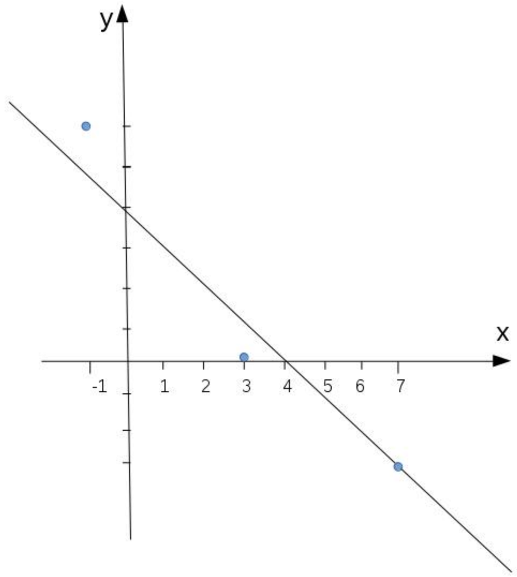
b) Stellen Sie das Normalengleichungssystem $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$ auf.
Ergebnis:

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

c) Lösen Sie das Gleichungssystem und bestimmen Sie die Ausgleichsfunktion $f(x) = ax + b$.
Ergebnis:
$a = -1$
$b = 4$

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

Ergebnis:



e) In welchen Fällen besitzt das Fehlergleichungssystem eine Lösung? Ist es im gegebenen Fall lösbar?
Ergebnis:
Im vorliegenden Fall ist das Fehlergleichungssystem nicht lösbar. Das Fehlergleichungssystem besitzt eine Lösung, wenn die 2-Norm des Fehlervektors = 0 ergibt.

Aufgabe 4: (Taylorreihe)

a) Geben Sie die Taylorreihe von $sin(2x)$ mit Entwicklungspunkt $x_0 = 0$ bis zur 5. Ordnung an (Hinweis: $sin(0) = 0$, $cos(0) = 1$)
Ergebnis:
$f^v(x) = 32cos(2x)$
$f(x) = 2x - \frac{4}{3}x^3 + \frac{4}{15}x^5$

b) Leiten Sie die Taylorreihe von $sin(2x)$ aus a) gliedweise ab und zeigen Sie dadurch, dass für die Ableitung gilt $(sin(2x))' = 2cos(2x)$.

Ergebnis:
$f'(x) = (2x - \frac{4}{3}x^3 + \frac{4}{15}x^5)' = 2 - 4x^2 + \frac{4}{3}x^4$

Aufgabe 5: (Hornerschema, numerisches Differenzieren und Nullstellen)

Gegeben ist die Funktion $f(x) = \frac{1}{3}x^4 - 2x^2 + \frac{1}{2}x$

a) Berechnen Sie an der Stelle $x_0 = 2$ den Funktionswert $f(2)$ unter Verwendung des Horner-Schemas.

Ergebnis:
$f(2) = -\frac{5}{3}$

b) Bestimmen Sie die numerischen Werte der ersten und zweiten Ableitung an der Stelle $x_0 = 0$ unter Verwendung der zentralen Differenzenformeln $Df(x)$ und $D^2f(x)$ mit einer Schrittweite von $h = 1$.

Ergebnis:
$Df(x_0) = \frac{1}{2}$
$D^2f(x_0) = 1$

c) Zur Bestimmung der Nullstelle $f(x) = 0$, verwenden Sie das Sekantenverfahren mit Startwerten $x_0 = -1$ und $x_1 = 1$ und berechnen Sie den Wert des ersten Iterationsschritts .

Ergebnis:
$x_2 = -\frac{4}{3}$
$i)[\frac{10}{3} - 1] < \delta$ dann $\delta = \frac{10}{3}$ und Stop
$ii)[\frac{10}{3} - 1] \geq \delta$ dann gehe zu i)

d) Vervollständigen Sie die Implementierung des Newtonverfahrens zur Nullstellensuche:

```
double newton(double (*f)(double), double (*df)(double), double x0)
   ...
}
```

Ergebnis:

```
  double delta 1e-12;
  int i=0;
  double xalt;
  do{
    xalt=x;
    x-=f(x)/df(x);
    i=i+1
    }
   while (i<100 fabs (x-xalt)> delta);
if (i==100) {return NAN;}
if (i<100) {return x;}
```

Aufgabe 6: (Partielle Differenzialgleichung)

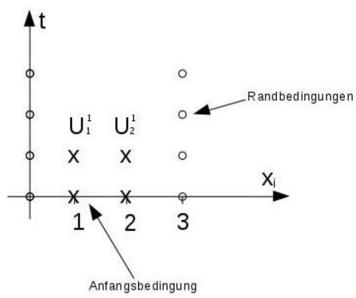
Gegeben ist das Raum-Zeit-Problem $u_t(t,x) = u_{xx}(t,x) - u(t,x) + x^2,\ x \in [0,3],\ t \geq 0$ mit Randbedingungen $u(t,0) = 0$, $u(t,3) = 2$ und Anfangsbedingung $u(0,x) = 1/2$ fr $0 < x < 3$.

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwrtsdifferenzen in der Zeit t und zentralen Differenzen im Ort x. Whlen Sie $\Delta x = 1$. Formulieren Sie das explizite finite Differenzenverfahren und geben Sie die Randbedingungen und die Anfangsbedingung in diskreter Form an.
Ergebnis:
die Anfangsbedingung: $U_i^0 = \frac{1}{2} \quad i = 1,2$
die Randbedingungen: $u_0^n = 0 \quad U_3^n = 2$
$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} = \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} - U_i^n + (x_i^n)^2$
$\Rightarrow U_i^{n+1} = U_i^n + \Delta t(\frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} - U_i^n + (x_i^n)2)$

b) Wählen Sie für die gegebene Diskretisierung $\Delta x = 1$ die größt mögliche Zeitschrittweite, so dass das explizize Differenzverfahren stabil bleibt.
Ergebnis:
$\Delta t \leq \frac{1}{2}\Delta(x^2) \Rightarrow \Delta t = \frac{1}{2}$

c) 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.

Ergebnis:



d) Berechnen Sie unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte u_1^1, u_2^1 der ersten Zeititeration.
Ergebnis:
$u_1^1 = \frac{1}{2}$
$u_2^1 = 3$

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

Musterlösung zur Klausur Modellierung und Simulation 10. Juli 2018, SS 2018

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

Aufgabe 1: Numerische Integration und Anfangswertproblem
Gegeben ist das Integral
$$I = \int_0^4 \frac{2x^2 - 2}{x + 1}\, dx$$

a) Berechnen Sie fr I einen Nherungswert durch Anwendung der Obersumme. Zerlegen Sie hierfr das Intervall $[0, 4]$ in vier Teilintervalle.

Ergebnis:

$f(1) = 0$
$f(2) = 2$
$f(3) = 4$
$f(4) = 6$

$I_0 = 12$

b) Berechnen Sie fr dieselbe Zerlegung wie in Aufgabenteil eine Nherung von I ber die Trapezformel.

Ergebnis:

$I_T = 8$

c) Wenden Sie nun die Simpsonformel an und bestimmen Sie den Nherungswert.

Ergebnis:

$I_S = 8$

d) Gegeben ist das gewöhnliche Differenzialgleichungssystem

$$\begin{aligned} y_1'(x) &= -2\, x\, y_1(x) \\ y_2'(x) &= y_2(x) + y_1(x) \end{aligned}$$

mit $y_1(-1) = \frac{1}{2}$, $y_2(-1) = \frac{1}{2}$ und $x \geq -1$. Geben Sie die Euler'sche Iterationsformel für dieses Differenzialgleichungssystem an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Eulerverfahrens.

Ergebnis:

$y_{1,k+1} = y_{1,k} + h\Big\{-2x_k y_{1,k}\Big\}$
$y_{2,k+1} = y_{2,k} + h\Big\{y_{2,k} + y_{1,k}\Big\}$
$y_{1,0} = \frac{1}{2}$ und $y_{2,0} = \frac{1}{2}$

1. Iterationsschritt

$y_1,_1 = 1$
$y_2,_1 = 1$

Aufgabe 2: Nullstellenberechnung und Taylorreihe

a) Gegeben ist die Funktion $g(x) = 4x^3 - x^2 - 2$. Verwenden Sie das Newtonverfahren zur Bestimmung einer Nullstelle $g(x) = 0$. Whlen Sie den Startwert $x_0 = 1$ und berechnen Sie den ersten Newton-Iterationsschritt.

Ergebnis:

$f'(x) = 12x^2 - 2x$
$x_1 = \frac{9}{10}$

b) Verwenden Sie nun das Bisektionsverfahren und berechnen Sie fr das Startintervall $[0, 1]$ den ersten Iterationschritt.

Ergebnis:

$f_0 = f(0) = -2$ und $f_1 = f(1) = 1$

$x_2 = \frac{1}{2}$

$f_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} - 2 < 0$

$\Rightarrow$ neues Intervall: $I_1 = [\frac{1}{2}, 1]$

$x_0 = \frac{1}{2}$ und $x_1 = 1$

c) Entwickeln Sie die Funktion $g(x)$ aus Aufgabenteil a) um die Stelle $x_0 = 0$ in eine Taylorreihe.

Ergebnis:

$$\begin{array}{l|l} g(0) = -2 & \\ g'(x) = 12x^2 - 2x & g'(0) = 0 \\ g''(x) = 24x - 2 & g''(0) = -2 \\ g'''(x) = 24 & g'''(0) = 24 \end{array}$$

$g(x) = -2 - x^2 + 4x^3$

Aufgabe 3: Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben sind die folgenden Messpunkte:

x_i	0	3	4	7
y_i	1	2	6	4

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 $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.

Ergebnis:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \\ 1 & 7 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 6 \\ 4 \end{pmatrix}$$

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

Ergebnis:

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & 14 \\ 14 & 74 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 13 \\ 58 \end{pmatrix}$$

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

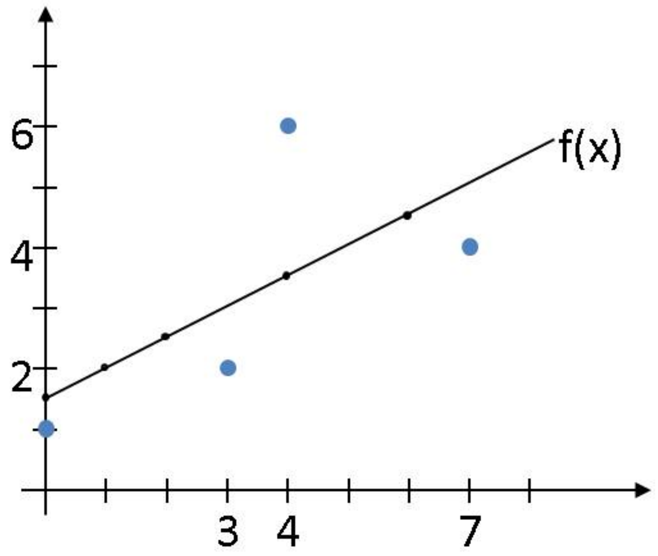
Ergebnis:

$a = \frac{3}{2}$
$b = \frac{1}{2}$
$f(x) = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}x$

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

Ergebnis:

Aufgabe 4: Interpolationspolynom und kubische Splines



a) Gegeben sind die Sttzpunkte $(-5,17),(-2,8),(-1,21),(0,42)$ und $(1,35)$. Bestimmen Sie das Interpolationspolynom.

Ergebnis:

$a_0 = 17$
$a_1 = -3$
$a_2 = 4$
$a_3 = 0$
$D_{5,4,3,2,1} = -1$

$p(x) = 17 - 3(x+5) + 4(x+5)(x+2) - 1(x+5)(x+2)(x+1)x(x-1)$

b) Gegeben sind die Stützpunkte $(0,0)$, $(1,1)$ und $(2,0)$. Stellen Sie zur Bestimmung der kubischen Spline-Funktionen

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

die erforderlichen 8 Bedingungen aus Stetigkeit, Differenzierbarkeit und den Randbedingungen $g_1'(0) = 0, g_1''(0) = 0$ auf.

Ergebnis:

$g_1(0) = 0$	$g_1'(1) = g_2'(1)$
$g_1(1) = 1$	$g_1''(1) = g_2''(1)$
$g_2(1) = 1$	$g_1'(0) = 0$
$g_2(2) = 0$	$g_1''(0) = 0$

c) Stellen Sie das Gleichungssystem für die Bestimmung der Koeffizienten a_{ij} auf.

Ergebnis:

$$
\begin{array}{ll|l}
a_{10} = 0 & & (i) \\
a_{13} + a_{12} + a_{11} + a_{10} = 1 & & (ii) \\
a_{23} + a_{22} + a_{21} + a_{20} = 1 & & (iii) \\
8a_{23} + 4a_{22} + 2a_{21} + a_{20} = 0 & & (iv)
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{l}
3a_{13}x^2 + 2a_{12}x + a_{11} = g_1'(x) \\
3a_{23}x^2 + 2a_{23}x + a_{21} = g_2'(x) \\
6a_{13}x + 2a_{12} = g_1''(x) \\
6a_{23}x + 2a_{23} = g_2''(x)
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{ll|l}
3a_{13} + 2a_{12} + a_{11} = 3a_{23} + 2a_{23} + a_{21} & & (v) \\
6a_{13} + 2a_{12} = 6a_{23} + 2a_{23} & & (vi) \\
a_{11} = 0 & & (vii) \\
a_{12} = 0 & & (viii)
\end{array}
$$

Aufgabe 5: Numerisches Differenzieren

a) Verwenden Sie den Ansatz $D^+\big(D^2 f(x)\big)$, um eine rechtsseitige finite Differenzenformel $D^{3,+}f(x)$ fr die 3. Ableitung $f'''(x)$ einer Funktion $f(x)$ zu formulieren.

Ergebnis:

$$D^+(D^2 f(x)) = \frac{1}{h^3}\big\{f(x+2h) - 3f(x+h) + 3f(x) - f(x-h)\big\}$$

b) Gegeben ist die Funktion $f(x) = 2x^3 - 3x^2 - 4x + 1$. Berechnen Sie den Nherungswert der Differenzenformel $D^{3,+}f(x)$ an der Stelle $x_0 = 1$ und fr die Schrittweite $h = 1/2$.
(**Hilfe:** $D^{3,+}f(x) = \frac{1}{h^3}\big(f(x+2h) - 3f(x+h) + 3f(x) - f(x-h)\big)$)

Ergebnis:

$$D^{3,+}f(x_0) = -12$$

c) Bestimmen Sie den Wert der 3. Ableitung $f'''(x)$ der Funktion an der Stelle $x = 1$ und vergleichen Sie das Ergebnis mit Teil b).

Ergebnis:

$$f'(1) = -4$$
$$e = 8$$

d) Vervollstndigen Sie die Implementierung der finiten Differenzenformel $D^{3,+}f(x)$ fr die Funktion `f`, die Schrittweite `h` und die Stelle `x_0`:

```
double D3_plus(double (*f)(double), double x_0, double h) {
  ...
}
```

Ergebnis:

```
double D3_plus(double (*f)(double), double x_0, double h) {
  double wert = 0.0;
wert = (1 / (h * h * h)) * (f(x_0 + 2 * h) - 3 * f(x_0 + h) + 3 * f(
return wert ;
}
```

Aufgabe 6: Raum-Zeit-Probleme
Die Ausbreitung einer Verunreinigung in einem fließenden Gewsser lsst sich beschreiben durch die partielle Differenzialgleichung

$$u_t(t,x) = -v_0 u_x(t,x) + D u_{xx}(t,x), \quad \text{für} \quad x \in [0,2] \quad \text{und} \quad t \geq 0$$

mit Randbedingungen $u(t,0) = 2$, $u(t,2) = 8$ und der Anfangsbedingung

$$u(0,x) = \begin{cases} 1, & \text{für} \quad 0 < x \leq \frac{3}{4} \\ 10, & \text{für} \quad \frac{3}{4} < x \leq \frac{5}{4} \\ 1, & \text{für} \quad \frac{5}{4} < x < 2 \end{cases}$$

Das Gitter ist so gewählt, dass $\Delta x = 1/2$ und $\Delta t = 1/8$ ist. Die Fließgeschwindigkeit sei $v_0 = 10$ und die Diffusionskonstante $D = 1$.

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und zentralen Differenzen in der Ortskoordinate x. Formulieren Sie fr $u_i^n, i = 0, \ldots, 4, n = 0, \ldots$ das explizite Differenzenverfahren. Geben Sie hierbei auch die Rand- und Anfangsbedingungen in diskreter Form an.

Ergebnis:

$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \{ 1 \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} - 10 \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \}$

Rand:

$u_0^n = 2$
$u_4^n = 8$

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

Ergebnis:

$u_1^1 = -4$
$u_2^1 = 1$
$u_3^1 = \frac{23}{2}$