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

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

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

Aufgabe 1: (Interpolationspolynome, Hornerschema 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.

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.

c) Berechnen Sie mit Hilfe des Hornerschemas das Restpolynom 2. Grades $f_2(x)$, das sich durch Abspalten des Linearfaktors $(x-2)$ aus der Funktion $f_3(x)$ (Aufgabenteil 1b)) ergibt.

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 $h = 1/25$.

e) Berechnen Sie den Wert der 1. 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.

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

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

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 $[1,2]$.

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

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

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

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 Euler'sche Iterationsformel für das Differenzialgleichungssystem an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h=1/2$ den ersten Iterationsschritt.

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 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.

b) Bestimmen Sie für die Schrittweite h aus a) den Wert der Trapezformel

c) und der Simpsonformel.

d) Berechnen Sie mit dem Newtonverfahren zur Bestimmung der Nullstelle von $f(x) = 0$ für den Startwert $x_0 = 1/2$ den ersten Iterationsschritt.

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.

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

```c
double bisektion(double (*f)(double), double x1, double x2) {
  ...
}
```

Die Funktion `bisektion` erwartet die Funktion `f` und die beiden Startwerte `x1`, `x2`. Ihr Rückgabewert ist die Nullstelle mit einer Genauigkeit von `1e-12`. Die Funktion `f(x)` braucht 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 Randbedingungen $u(t, 2) = 3$, $u(t, 5) = 0$ und Anfangsbedingung $u(0, x) = 1$ für $2 < x < 5$.

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und 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.

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.

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.

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 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}^{(k)}$.