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

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

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

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.

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

c) Verwenden Sie das Newtonverfahren zur Bestimmung einer Nullstelle. Wählen Sie den Startwert $x_0 = 2$ und berechnen Sie den ersten Newton-Iterationsschritt.

P: d) Vervollständigen Sie die Implementierung des Newtonverfahren 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).

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 $f_2(x) = x$, so dass die $\sum_{i=1}^{3}(y_i - f(x_i)))^2$ minimal wird. Gehen Sie hierzu wie folgt vor:

a) Formulieren Sie das Fehlergleichungssystem $\boldsymbol{A\lambda} = \boldsymbol{y}$.
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 $f(x) = a + bx$.

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.

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

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

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.

Aufgabe 4: Partielle Differenzialgleichung

Gegeben ist das Raum-Zeit-Problem $u_t = u_{xx} - 2u_x - x^2$ für $2 \le x \le 6$ und $t \ge 0$ mit Randbedingungen $u(t, 2) = 5$, $u(t, 6) = 3$ und 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.

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

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

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 2 exakt differenziert.

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 $h = 1/2$.

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 $h = 1/2$.

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.

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 Euler'sche Iterationsformel für diese Differenzialgleichung an.
b) Bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ die ersten beiden Iterationsschritte des Eulerverfahrens.
c) Geben Sie das Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung für diese Differenzialgleichung an.
d) Bestimmen Sie für $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Runge-Kutta Verfahrens 2. Ordnung.
e) Zeigen Sie, dass $y(x) = \frac{1}{1+x^2}$ die Lösung des Anfangswertproblems ist und bestimmen Sie die Fehler des Eulerverfahrens e^{Eu} und des Runge-Kutta Verfahrens e^{RK} eweils nach dem ersten Iterationsschritt.

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

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

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