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

Klausur zur Modellierung und Simulation
23. Juli 2019, SS 2019

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

Aufgabe 1: Nullstellenverfahren und Differenzenformeln

Gegeben ist die Funktion $f(x) = x^3 + 6x^2 + 3x - 10$. Die drei Nullstellen dieses Polynoms liegen bei $x_1^\star = -5$, $x_2^\star = 1$ und $x_3^\star = -2$.

a) Verwenden Sie die Startwerte $x_0 = 0$ und $x_1 = 2$ und erläutern Sie den ersten Iterationsschritt des Bisektionsverfahrens. Was fällt auf ?

b) Berechnen Sie ebenfalls zu den Startwerten $x_0 = 0$ und $x_1 = 2$ den ersten Näherungswert x_2 des Sekantenverfahrens (regula falsi).

c) Stellen Sie nun die Newtonformel auf und berechnen Sie für den Startwert $x_0 = 0$ den ersten Iterationsschritt.

d) Bestimmen Sie den Wert der rechtsseitigen Ableitung $D^+f(x_0)$ an der Stelle $x_0 = 0$ für eine Schrittweite von $h = 1/2$.

Aufgabe 2: Polynominterpolation und numerische Integration

a) Gegeben sind die Messpunkte $(-1, -4)$, $(1, 2)$, $(2, 7)$ und $(4, 11)$. Bestimmen Sie durch Anwendung des Newton-Algorithmus (Schema der Dividierten Differenzen) das Interpolationspolynom, das die Messpunkte verbindet.

b) Berechnen Sie den Wert der Obersumme für das Integral

$$\int_0^2 p(x)\,dx = \int_0^2 \left(3x^3 - 2x^2 + 2x\right) dx.$$

Zerlegen Sie hierfür das Intervall $[0, 2]$ in zwei Teilintervalle.

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

d) über die Simpsonformel.

e) Zeigen Sie, dass die Simpsonformel das gegebene kubische Polynom $p(x)$ exakt integriert.

Aufgabe 3: Partielle Differenzialgleichung und Taylorformel

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

a) Diskretisieren Sie die partielle Differenzialgleichung mit Vorwärtsdifferenzen in der Zeit t und zentralen Differenzen im Ort 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 hiebei auch die Randbedingungen und die Anfangsbedingung in diskreter Form an.

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

Aufgabe 4: Lineares Ausgleichsproblem

Gegeben sind die folgenden Messpunkte:

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

Gesucht ist eine Ausgleichsfunktion der Form: $f(x) = ax + bx^2$. 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 $f(x) = ax + bx^2$.

Aufgabe 5: Splines

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

a) Skizzieren Sie in einem $x - g(x)$ Diagramm das Vorgehen zur Bestimmung der kubischen Spline-Funktion $g(x)$ in den beiden Teilintervallen $0 \leq x \leq 1$ und $1 \leq x \leq 2$.

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

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

c) Prüfen Sie, ob die Funktion $g(x)$ durch den Punkt $(1, 2)$ verläuft.

Aufgabe 6: Taylorformel

Gegeben ist eindimensionale Wärmeleitungsgleichung $u_t(t, x) = u_{xx}(t, x)$ und das implizite Lösungsverfahren

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

a) Entwickeln Sie die Anteile $u(t + \Delta t, x)$ als Funktion von t bei festem x und $u(t + \Delta t, x + \Delta x)$, $u(t + \Delta t, x - \Delta x)$ als Funktion von x bei festem $t + \Delta t$ jeweils in Taylorreihen bis einschließlich 4. Ordnung.

d) Bestimmen Sie durch Einsetzen der Taylorreihen den Diskretisierungsfehler für das Differenzenverfahren

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

in der Zeit- und Ortsvariablen.

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