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

Klausur zur Modellierung und Simulation
5. Juli 2016, SS 2016

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

Aufgabe 1: Interpolationspolymon 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.

b) Betrachten Sie nur die ersten 3 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

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

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 Euler'sche Iterationsformel für diese Differenzialgleichung an und bestimmen Sie für eine Schrittweite $h = 1/2$ den ersten Iterationsschritt des Eulerverfahrens.

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

Aufgabe 3: Taylorreihe 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 Taylorreihe um $x_0 = 2$.

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

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

d) Bestimmen Sie den Wert des Integrals über die Simpsonformel I_S.

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 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 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.

b) Berechnen Sie im Raum-Zeit-Gitter unter Verwendung des expliziten Differenzenverfahrens die Werte $u_i^1, i = 1,2,3$ der ersten Zeititeration.

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

Aufgabe 5: Horner, 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.

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 $h = 1$.

c) Zur Bestimmung der Nullstelle $f(x) = 0$, verwenden Sie das Sekantenverfahren mit Startwerten $x_0 = 1$ und $x_1 = 2$ und berechnen Sie den Wert des ersten Iterationsschritts.

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

e) 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 `$x_0$`. 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).

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

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

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};
  ...
}
```

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