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

Klausur zur 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 für I einen Näherungswert durch Anwendung der Obersumme. Zerlegen Sie hierfür das Intervall $[0, 4]$ in vier Teilintervalle.

b) Berechnen Sie für dieselbe Zerlegung wie in Aufgabenteil eine Näherung von I über die Trapezformel.

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

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.

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 $g(x) = 0$. Wählen Sie den Startwert $x_0 = 1$ und berechnen Sie den ersten Newton-Iterationsschritt.

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

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

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

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 Ausgleichsgerade $f(x) = a + bx$.

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

Aufgabe 4: Interpolationspolynom und kubische Splines

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

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

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

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

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

Aufgabe 5: Numerisches Differenzieren

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

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

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).

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

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

Aufgabe 6: Raum-Zeit-Probleme

Die Ausbreitung einer Verunreinigung in einem fließenden Gewässer lässt 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 für $u_i^n, i = 0, \ldots, 4, n = 0, \ldots$ das explizite Differenzenverfahren. Geben Sie hierbei auch die Rand- und Anfangsbedingungen in diskreter Form an.

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.

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